昭和38年７月２日第３種郵便物認可
2007年６月１日発行　第45巻６号　毎月１回１日発行
ISSN 0386―2240

数理科学

6
2007

特集　物理における位相の世界
量子現象の幾何学



No.528

サイエンス社

MATHEMATICAL SCIENCES
Number 528 June 2007

物理における位相の世界

量子現象の幾何学

表紙：戸川　隼人

お得な定期購読をおすすめします

毎号確実に御手元へ

地域によって書店店頭に陳列されない場合があります．**郵送料小社負担**にて確実に御手元へ届く定期予約購読をおすすめします．

予約購読は１年間（本誌のみ）11,000 円，１年間（本誌＋別冊２冊）14,500 円，半年間（本誌のみ）5,500 円，半年間（本誌＋別冊１冊）7,250 円です．（税込み価格）

造本コストは更に上昇気味です．小社としてもあらゆる努力をもって廉価で提供してゆきたいと思っておりますが，定価改定の止むなき事態がかんがえられます．この場合予約購読期間中のものにつきましては料金据置きとなります．なお，臨時別冊のご注文については，本誌予約購読者の方には，商品到着後のお支払いにて承ります．

お申し込みは本誌とじ込みの振替用紙を御利用下さい．

数理科学特集一覧

63 年/7～2004 年/7 省略
2004 年/8 古典力学の新展開
/9 可換から非可換へ
/10 マクロ世界の量子論
別冊 時間論の諸パラダイム
/11 符号化理論の新時代
/12 素粒子物理学の未解決問題
2005 年/1 素数の魅力と不思議
/2 エンタングルメント理論とその展開
/3 最新 脳の数学理論
/4 量子重力理論最前線
別冊 相対論の歩み
/5 ベクトル
/6 物理法則と方程式
/7 量子異常とは何か
/8 モジュライの広がり
/9 対称性とは何か
/10 不確定性原理の新展開
別冊 スーパーストリング
/11 0 の発見
/12 現代代数学への誘い
2006 年/1 偶然から必然へ
/2 物理法則の直観的理解
/3 〈強い力〉
/4 「空間」とは何か
別冊 量子の新世紀
/5 数学と物理の対話
/6 発見とひらめき
/7 重力は語る
/8 ネットワーク科学の数理
/9 ランダムネス
/10 ツイスター理論の拡がり
別冊 場の量子論の拡がり
/11 固有値問題のひろがり
/12 素粒子像の探究
2007 年/1 ヤング図形で遊ぶ物理と数学
/2 ランダム行列の広がり
/3 現代物理における超対称性
/4 現代数学はいかに使われているか［代数編］
別冊 双対性の世界
/5 数学の直観的理解

数理科学臨時別冊一覧

06 年/7 ソリトンと物理学
06 年/9 確率的情報処理と統計力学
06 年/11 超対称性理論
06 年/12 理工系のためのトポロジー・圏論・微分幾何
07 年/1 ゲノム進化を考える
07 年/3 非平衡統計力学
07 年/5 超幾何関数入門

「数理科学」のバックナンバーは下記の書店・生協の自然科学書売場で特別販売しております

紀伊國屋書店本店（新宿）
紀伊國屋書店新宿南店
あおい書店中野本店
オリオン書房ノルテ店（立川）
くまざわ書店本店（八王子）
くまざわ書店桜ヶ丘店（多摩）
書泉グランデ（神田）
書泉ブックタワー（秋葉原）
三省堂本店（神田）
ブックファースト渋谷店
リブロ池袋店
ジュンク堂書店（池袋）
ジュンク堂書店（新宿）
芳林堂（高田馬場）
八重洲ブックセンター（東京駅前）
丸善丸の内本店（東京駅前）
ブックファースト青葉台店（横浜）
栄松堂ジョイナス店（横浜）
有隣堂イセザキ町店（横浜）
有隣堂西口・東口（横浜）
有隣堂厚木店（厚木）
文教堂ブックセンター（川崎）

旭屋船橋店
戸田書店静岡本店
ジュンク堂大阪本店
紀伊國屋書店梅田店（大阪）
旭屋本店（大阪）
アバンティブックセンター（京都）
ジュンク堂書店（京都）
ジュンク堂書店（神戸）
ジュンク堂三宮駅前店（神戸）
ジュンク堂書店（大分）
喜久屋書店倉敷店
紀伊國屋書店松山店
紀伊國屋書店福岡店
紀伊國屋書店福岡本店
ジュンク堂福岡店
紀伊國屋書店新潟店
旭屋札幌店
金港堂（仙台）
金港堂パーク店（仙台）
ジュンク堂書店（仙台）
鹿島ブックセンター（いわき）
友朋堂（つくば）

——大学生協・売店——
東京大学 本郷・駒場
東京工業大学 大岡山・長津田
東京理科大学 新宿
早稲田大学 理工学部
慶応義塾大学 矢上台
電気通信大学・福井大学
筑波大学 大学会館書籍部 第一学群書籍部
埼玉大学
名古屋工業大学・愛知教育大学
大阪大学・神戸大学 ランス
京都大学・九州工業大学
東北大学 理薬・工学
室蘭工業大学
徳島大学 常三島
愛媛大学 城北
山形大学 小白川
島根大学
学習院大学 成文堂
北海道大学 クラーク店

June 2007 MATHEMATICAL SCIENCES Number 528

特集／物理における位相の世界

物理学における位相

青 木　秀 夫

1. はじめに

P「『位相』の総論をしなくちゃならないんだよ.」
S「位相といえば，波動関数は絶対値と位相からなりますね.」
P「それで済めば話は簡単なんだがね．そもそも，日本語で位相と言ったときには，実は 2 つのことを指すのが厄介だ．つまり，数学的に位相と言ったときにまずはイメージするのは，英語で言えば **topology** というやつで，定義口調で言えば『極限や連続の概念が定義できるように，集合に導入される数学的構造』だな．それから，物理でよく使われるのは，英語で言えば **phase** というやつで，『振動・波動のような周期的現象において，着目する時刻・場所において，振動がどの段階にあるかを示す変数』だ．この後の話の都合上，様々な概念の間の相関図（図 1）を掲げておこう，この意味はおいおい分かってくる.」
S「なるほど，波動関数の位相は phase のほうで，

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = |\Psi(\boldsymbol{r},t)|e^{i\theta(\boldsymbol{r},t)}$$

と書いたときの $\theta(\boldsymbol{r},t)$ のことですね．しかし，ちょっと変だな，量子力学の教科書には，『磁場など時間反転対称を破るものがなければ，定常状態の波動関数は常に実にとることが可能』，と書いてありますね.」
P「定常でも状態に縮退があれば，縮退状態の線形結合の取り方の自由度を利用して複素にできる．そうしなくても構わないけれど，電子の平面波のように，電流が流れている状態を作りたければそうせざるを得ないね，実際電流 $\boldsymbol{j}$ は

$$\boldsymbol{j} \propto \nabla\theta$$

だから，波動関数が複素の場合しか生じない．
ここでちょっと面白い例をあげてみようか．物理で，メゾスコピック系とかナノ構造と呼ばれる，微視的サイズと巨視的サイズの間のサイズをもつ系の物理が最近良く調べられている．このような系では，波動関数の位相が系全体にわたって保た

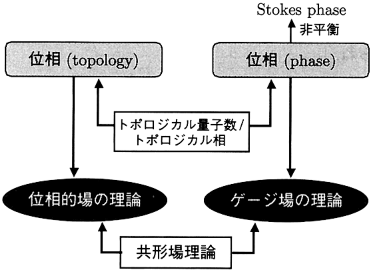


図 1　位相にまつわる様々な概念の間の相関図.

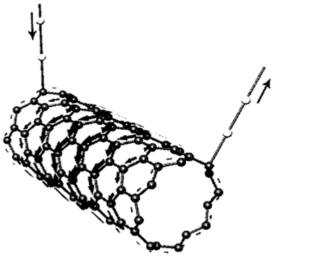


図2　炭素ナノチューブに電極をつけ，電流を流すと，波動関数の位相の干渉効果により，チューブを回る電流が流れ得る[1]．

れることが多いので，波動関数の位相の効果の宝庫のようなものだ．一つの例は，炭素からなるシリンダー状の構造があって，炭素ナノチューブ (nanotube) と呼ばれている．平面波が右向きと左向きに走り得るのと同様，このチューブでは，チューブの円周を，ある軸方向から見たときに，時計周りに回る波の状態と，反時計周り状態とが縮退している（図 2)．この系に，電極を付けて，チューブの一方の端から他方の端まで電流を流すと，量子力学的位相の干渉効果が生じて，流した電流とは直交するような，チューブの円周方向に巨大な(軸方向電流より桁違いに大きい）電流が流れ得ることが理論的に示されている[1]．いわば分子ソレノイドだ．これも，波動関数の位相の効果だ．

また，定常状態に限らず，一般に時間依存する問題(ハミルトニアンが時間依存するとか，ハミルトニアンは定常だが非平衡状態を考えるとか）を考えると，必然的に複素になるね，時間依存 Schrödinger 方程式 $i\hbar(\partial/\partial t)\Psi(t) = \mathcal{H}(t)\Psi(t)$ が i を含むからね.」

S「そういえば，実数から複素数への拡張だけで良いのでしょうか，グラスマン数とかいうのもありましたね.」

P「あれは，本来は場の演算子で表すべきフェルミオンの非可換性を数として表す便法だよ．それよりは，non-Abelian 位相というものも考えられて，これはいわば位相 θ が普通はスカラーなのを，行列に拡張したようなもので，特殊な数と言えないこともない．

位相をもっと一般的に捉えれば，ゲージ場理論ということになるが，ゲージ場理論で，'t Hooft, Politzer, Gross and Wilczek によって 1970 年代に non-Abelian ゲージ理論が出たのは画期的だった．後で説明する，**接続 (connection)** としての位相にも non-Abelian バージョンがあるんだね.」

S「**Berry の位相**というのも良く聞きますね[2]．」

P「そう，幾何学的位相というやつだね.」

S「あれは何故『幾何学的』というのですか.」

P「君の出した，$\Psi(\boldsymbol{r},t) = |\Psi(\boldsymbol{r},t)|e^{i\theta(\boldsymbol{r},t)}$ という位相は，定常状態に対しては露に $\theta(\boldsymbol{r},t) = -(E/\hbar)t$ （E は固有エネルギー）と与えられるように，運動方程式（今の場合 Schrödinger 方程式）で完全に与えられる．これは履歴には依らない．ところが，本当に時間依存の問題，例えばハミルトニアンがパラメータに依存していて，このパラメータが時間的に変化するとしよう．すると，たとえ Et を，各瞬間でのハミルトニアンの固有値の時間積分で置き換えても，余分なファクター $\exp(-i\int_0^t \langle\Psi|\dot{\Psi}\rangle dt)$ が残る．

実は，ここら辺は，数学的にはベクトル束 (vector bundle) という考えですっきり理解できる．波動関数というのは，一般的にはヒルベルト空間のベクトルだ．ハミルトニアン $\mathcal{H}(C)$ が何かのパラメータ C に滑らかに依存し，C が時間的変化するとき，このベクトル束の変化を追わなければならない．これは一般には複雑だけれど，パラメータの時間的変化が十分ゆっくりな場合は，『断熱定理』というのがあって，波動関数の絶対値は不変で，位相のみが変化する．ただし，その位相は，パラメータがパラメータ空間の中でどのような軌跡で動くかに依るので，先ほどの力学的位相と区別して，幾何学的位相と言っている．これが Berry の位相だ．数学的には，系を断熱変化させるということは，ベクトル束を位相空間上で『平行移動』することに対応して，様々な平行移動は一種の群をなす（図 3)．これは位相幾何学ではホロノミー (holonomy) と呼ばれている．ホロノミーについては，本特集号では倉辻氏により解説されている．

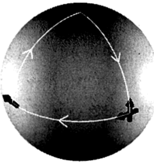
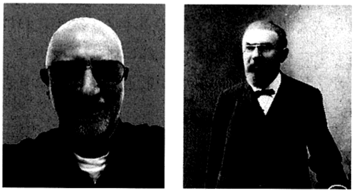


図3　曲面上でのベクトルの平行移動.



(a)　(b)

図4　(a) ベリー (Michael Berry) (http://www.phys.bris.ac.uk/people/berry_mv/index.html. より本人の許可を得て掲載). (b) ポアンカレ (Henri Poincaré, 1854–1912).

ここで, Berry の写真を掲げておこう (図 4(a))[3]. 並べて, topology を象徴する数学者の一人として, Poincaré の写真も掲げておこう (図 4(b)). 最近彼の予想が解決して話題になったりしたからね.」

S「Berry の位相は量子力学でしょうけれど, 波動関数の位相そのものは量子力学の専売特許じゃないですよね.」

P「それはそうだ. 振動・波動は元々古典力学の概念だ. 光もそうだけれど, 実はちょっと微妙だ. 以前に, 光に Berry 位相効果がある, という実験や理論が出て, 光波は Maxwell 方程式で記述される電磁場なので, 量子力学に基づく Berry の位相と解釈できるはずがない, という議論があった[4]. だけれども, 考えてみると, 波動関数 Ψ を絶対値と位相に分けて書いたとき, 位相は実は作用 S だね, これは量子力学の初歩で習う. Landau–Lifshitz の教科書で言えば, quasi-classical case という章だ. 実際, 非常に大雑把に言って, 経路積分的に考えれば, $\Psi(\boldsymbol{r},t)=\left[\sum_{\rm path} e^{iS(\rm path)}\right]\Psi(\boldsymbol{r}_0,t_0)$ (S(path) は各経路上での作用, $(\boldsymbol{r}_0,t_0)$ は出発点) となって, 古典近似したければ, 経路の和の代わりに, S の停留値を与える経路 (古典的軌跡) をとればよい. 波動光学の場合も, 媒質の性質 (屈折率など) が空間的にゆっくり変わる場合には, 光波の伝播を記述する方程式を立てれば, それは微分方程式として Schrödinger 方程式と似たような形になり, 特に光には偏光という内部自由度があるから, 並行移動の際の接続として Berry の位相が出てくる, という構造だ. 本特集では小野田氏により詳しく解説されている.

また, 経路積分に関しては, 量子力学で『量子異常』という面白い性質がある. この量子異常を経路積分で定式化することもできるが, これについては本特集では藤川氏により詳しく解説されている.」

2. トポロジカル量子数

以上で位相を概観したが, 個々のテーマについてもう少し詳しく眺めてみよう. まず, 位相には topology と phase があると言った. 量子状態は一般に量子数をもつが, この中に, **トポロジカル量子数**と呼ばれるものがあり[5], これと波動関数の phase と関連する. 普通の量子数は波動関数の詳細にもちろん依るが, トポロジカル量子数では詳細に依らない. 最も簡単な例が, Dirac による磁荷の量子化で, もし磁荷 (magnetic monopole) があったときに, 電磁場 ($U(1)$ ゲージ場) 入りの Schrödinger 方程式を解くと, 波動関数が一価 (空間内の任意の閉じた曲線に添って波動関数の位相をたどると, 一周後 2π の整数倍になる) の必要があり, このために磁荷 (と電荷の積) が量子化していることが分かる. 別の典型例は, 超流動体, 超伝導体, Bose 凝縮体において波動関数が巨視的にコヒーレントな位相をもっている場合である. このときやはり任意の閉じた曲線に添った波動関数の位相変化は 2π の整数倍 n でなければならない. これらがトポロジカル量子数の最も簡単な例となる. 逆に (n はゼロでない整数値をとれるか

ら)，超流動体，超伝導体，Bose 凝縮体においては渦（vortex）というトポロジカル励起が許されることが分かる．Bose 凝縮については本特集では上田氏により詳しく解説されている．

また，ベクトル束の接続という観点から，トポロジカル不変量を構成することもできる．トポロジカル不変量は，場の理論においてよく出てくるものであり，上記の量子化された磁荷や渦度（vorticity）もその例であるが，固体物理において，空間 2 次元の系に対して顕著な例がある．量子ホール効果である．量子ホール効果は，2 次元空間を走る電子に，2 次元面に垂直に磁場をかけた系で起きるが，Thouless 等[6]が示したように，線形応答理論によるホール伝導度 σ_{xy} の表式は，系が周期的だとして磁気 Brillouin 帯上で平均すると，e^2/h (e: 素電荷，h: プランク定数）を単位として

$$\langle\sigma_{xy}\rangle = \frac{1}{2\pi i}\sum_{\alpha}\iint\left(\left\langle\frac{\partial\Psi^{\alpha}}{\partial A_x}\middle|\frac{\partial\Psi^{\alpha}}{\partial A_y}\right\rangle - \left\langle\frac{\partial\Psi^{\alpha}}{\partial A_y}\middle|\frac{\partial\Psi^{\alpha}}{\partial A_x}\right\rangle\right)dA_x dA_y$$

で与えられる．ここで Ψ^{α} は α 番目の固有関数，$\boldsymbol{A}=(A_x, A_y)$ はベクトル・ポテンシャルであり，被積分関数は，A_x, A_y を変化させたときに波動関数（ベクトル束）がどう変化するかに関する**曲率**になっていて，その積分は，丁度「ガウス・ボンネ（Gauss–Bonnet）の定理」において，曲面上で曲率を積分すると整数（オイラー数）になるのと同様整数（微分幾何学で言うところの第一チャーン指数（first Chern character））となる．

Thouless 等がこれを具体的に示したのは，単純な 2 次元系ではなく，2 次元に周期性（結晶格子の周期性や，周期的外部ポテンシャル）を加えた場合に対してである．このとき，ランダウ量子化とブラッグ反射の干渉により，各ランダウ準位の内部に細かいギャップが自己相似的に開き，エネルギー・スペクトルはフラクタルになり，Hofstadter の蝶と呼ばれている．このとき，分裂したバンド一つ一つが量子ホール伝導度（トポロジカル量子数）を担っている．

量子ホール効果は，普通は 2 次元特有な現象である．しかし，実は，3 次元空間における量子ホール効果も可能なことが理論的には示唆されている．このためには，強磁場をかけた 3 次元系において，エネルギー・スペクトルにギャップが開くことが必要となる[7]．普通は 3 次元系に磁場をかけても，ギャップは開かないが，もし 3 次元系に周期性を加えれば，磁場の異なる成分（例えば xy 面に垂直な成分と yz 面に垂直な成分）に対するランダウ量子化の干渉が起きることにより Hofstadter 蝶の 3 次元版が生じる．このとき，3 次元における量子ホール効果が生じ，これに対するトポロジカル量子数を求め得ることが最近越野等により理論的に見出されている[8]．

以上のようなトポロジカル量子数により特徴付けられる相を，トポロジカル量子相と呼ぶことがある．本特集では押川氏により解説されている．面白いのは，「トポロジカル相（例えば分数量子ホール液体）では基底状態が素励起の性質まで規定してしまう」という著しい特徴があり，これは分数量子ホール系では素励起が分数統計粒子であることに反映される．

3. 分数量子ホール効果における位相と位相的場の理論

波動関数の位相という観点からすると，空間 2 次元というのは特に面白い．というのは，波動関数を規定する群そのものが普通の 3 次元の場合と違ってしまう．空間 3 次元の場合は，同種粒子を交換したとき波動関数は $\Psi(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) = e^{i\theta}\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ のように位相が変わり，もう一度交換すれば元に戻るので $\theta = 0, \pi$ であり，前者がボゾン，後者がフェルミオンに対応する．数学的には粒子の配置は**置換群**で分類でき，その既約表現がフェルミオンやボゾンを表した．一方，2 次元空間では，多粒子系の世界線（位置座標 ＋ 時間における粒子の軌跡）は図 5 のように一般に絡み合った紐の集まりとなり，この絡みを連続変形で解くことはできない，という点が大いに違う．このときは粒子

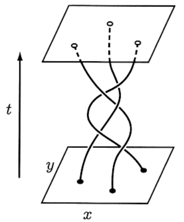


図 5　2 次元空間における多粒子の世界線.

の配置は履歴をひきずることになり，これを規定するのは置換群ではなく，**組み紐（braid）群**である．この群の既約表現は，フェルミオンやボゾンだけでなく，後述の分数統計粒子（anyon）も含む．

この組み紐間の巻き数は保存量となり，数学的には，波動関数の位相をホモトピー（homotopy）により分類できる．これをラグランジアンで言えば，Chern–Simons（チャーン・サイモンズ）場というゲージ場を用いて，**トポロジカル項**と呼ばれる項をラグランジアンに加えることに当たる[9]．

分数量子ホール効果では，2 次元空間を外部磁場中で走る電子を考えるが，実際これを Chern–Simons ゲージ場の理論で扱うことができる．磁場中でも勿論電子は強く斥力相互作用しているから，分数量子ホール効果は「強い電子相関」の問題となるが，量子ホール効果は 2 次元空間で起きるものであり，この空間次元特有のゲージ場の振舞いが，「複合粒子」などの直観的な描像を可能にする．ここで現れた Chern–Simons 場というのは，数学的にはベクトル束の微分幾何学に出てくる概念で，空間の計量に依らないある外微分形式で表されるので，トポロジカルな場と呼ばれる．

分数量子ホール効果（その詳細は文献 10）を参照）に対するこのような場の理論の一つの帰結は，分数量子ホール状態は複合ボゾンの Bose 凝縮状態と見なせ，ある種のゲージ対称性破れ状態ということである．ただし，そこで立っている秩序は，流石に 3 次元 Bose 凝縮のような長距離秩序ではなく，（2 次元で許される中では最も長距離的な）巾型相関となる．面白いことに，そもそもこの秩序は電子間斥力相互作用から生じたにも関わらず，この巾的相関の指数は相互作用の大きさには依らず，導入するトポロジカル項の係数のみに依る．このためこの秩序はトポロジカルな秩序とも呼ばれる．

基底状態がこのようなトポロジカル状態であると，それからの励起が，anyon という分数統計粒子になる．したがって，系の性質（現れる粒子の統計性など）は，ハミルトニアンを見た瞬間に必ずしも分かるのではなく，基底状態を参照して決まるものである，という意味で，一種の dynamical symmetry になっている．また，Chern–Simons 理論の枠組みは，**共形場の理論**とカップルさせることもできて，分数量子ホール効果ではそれも議論されている．

さて，分数量子ホール系の有効理論は，Chern–Simons ゲージ場であると言ったが，正しく言うとこれは平均場レベルでのみ成り立つ．それでは，『逆問題』を考えたらどうだろうか．分数量子ホール状態を表す試行状態として Laughlin によって手で構成された状態がある．この Laughlin 状態は，色々な書き方があり，第一量子化では，

$$\Psi_{\nu=1/q} \propto \prod_{i<j}(z_i - z_j)^q \tag{1}$$

（ここで ν はランダウ準位占有率，q は奇数，$z = x + iy$ は各電子の複素座標）という風に表される．露な「複合ボゾンの凝縮状態」としては，

$$\Psi_{\nu=1/q} \propto \left(\int d^2z\,\Psi^\dagger(z)\right)^N |0\rangle, \tag{2}$$

$$\Psi^\dagger(z) \equiv \psi^\dagger(z)U^q(z)e^{-|z|^2/4} \tag{3}$$

（ここで $|0\rangle$ は真空，N は電子数，$\psi^\dagger$ は最低ランダウ準位に電子を生成する演算子，U は準正孔演算子）という風に表されるし，さらに共形場を意識すれば，

$$\Psi_{\nu=1/q} \propto \left\langle \prod_i^N e^{i\sqrt{q}\phi(z_i)} \exp\left[-i\int d^2z'\sqrt{q}\rho_0\phi(z')\right]\right\rangle \tag{4}$$

(ここで ϕ は2次元の場で対数相関 $\langle\phi(z)\phi(z')\rangle \sim \log(z-z')$ をもつもの，$\rho_0 = 1/2\pi q$ は電子密度)．問題は, Laughlin 状態は元のハミルトニアン（クーロン斥力相互作用する2次元電子系に強磁場をかけた系）の近似解であるが，逆に，この波動関数を厳密解としてもつハミルトニアンは何か？ この逆問題も Haldane により解かれていて，答えは，実空間で書けば複雑であるが，電子間相互作用を，互いの角運動量に分解して，高次のものをカットオフしたものとなる．直感的には，長距離クーロン力の短距離部分のみを残したものである．つまり，Laughlin 波動関数（Chern–Simons 理論の平均場解）は，短距離相関を取り入れた状態になっている．これは，分数量子ホール系において，一種の演算子積展開（operator product expansion）

$$e^{i\sqrt{q}\phi(z)}e^{i\sqrt{q}\phi(z')} \sim (z-z')^q e^{2i\sqrt{q}(z+z')/2} + \text{高次}$$

のように，相対角運動量 q から始まることから，代数的に示すこともできる．ちょっと考えると，電子間に斥力があるだけで，超流動・超伝導におけるような凝縮が起きるなんて不思議極まりない！ しかし，文献10)でも強調したように，ここには巧妙な仕組みがあり，短距離斥力が複合粒子描像を良くし，これが，複合粒子の集合体としての Chern–Simons ゲージ場理論を良い有効模型にし，それがトポロジカル相をもたらした，という，$(2+1)$ 次元の特徴を最大限に活用したメカニズムを実現しているのである．

Anyon は，上で述べたように，空間2次元での粒子たちは置換群ではなく組み紐群で規定され，互いの周りを一周しても元に戻る必要はなく，半端な位相が残り得ることから発生する．つまり，$\theta \neq 0, \pi$ である．最近では，このような anyon とその量子エンタングルメントを量子 qubit に用いて，量子計算に用いる，というファンシーな提案もなされている[11]．

数学的には，組み紐群の表現として，この θ がスカラーではなく多次元表現（行列のようなもの）も可能なことが知られており，特に Moore–Read により，分数量子ホール系でその存在の可能性が議論されている[12]．彼等はこれを non-abelian 統計と呼んでいる．特に，下から2番目のランダウ準位が半分だけ詰まった状態に対して，この統計をもつような BCS ペアリング状態（Pfaffian 状態と呼ばれる；詳しくは，中島・青木：『分数量子ホール効果』[10]）と呼ばれるものが提案され，これも（天下りではなく）上記の演算子積展開から構成することもできる．

さて，分数量子ホール効果がこのように面白い性質をもっているのは，一にかかって，出発点が，Chern–Simons ゲージ場を採用すれば，トポロジカル項から成っていたことにある．このような場合の場の理論は，より一般に，Witten により1980年代に**位相的場の理論**（topological field theory）として発展させられている．これは，元々かなり数学的なものであるが，物性物理では実はそれが量子ホール系というもので，実現されているわけである．位相的場の理論の詳細は，本特集号では江口氏により，詳しく解説されている．

4. スピン自由度，軌道自由度，多準位と位相

電子はスピンという内部自由度をもっている．そのために，電子の運動方程式を，例えば準古典近似で考える際に，丁度上で光波について述べたときと同様な，Berry 位相効果が生じる．このために，スピン・ホール効果のような，興味深い物理現象が実験・理論的に解析されている．本特集号では村上氏により詳しく解説されている．

Berry の位相は，多軌道系，つまり各原子に軌道が複数あるような系でも現れる．多軌道は，遷移金属やその化合物（関与するのは5重に縮退した d 軌道）ではごく普通のことである．このような電子系に影響を与える何らかのパラメータを断熱的に変えたときに，電子の波動関数の位相まで注意すれば，変化は余計な位相を波動関数に与える．一般に複数軌道系では電子がある場所から別の場所に移動するときには Berry の位相 θ が発生

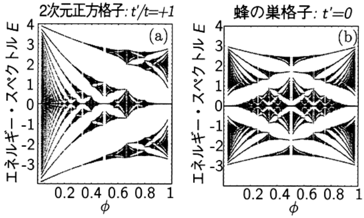


図6　(a) 2次元正方格子に垂直に強磁場をかけたときのエネルギー・スペクトル E を磁場（単位胞を貫く磁束を磁束量子で測った ϕ）の関数として示す．(b) 蜂の巣格子に対する同様な図[14]．

して，この位相を経路にわたって積分した

$$w = \frac{1}{2\pi}\int_C \nabla\theta \cdot d\boldsymbol{r}$$

はトポロジカル量（Chern 数）であることは，Wilczek–Zee が指摘していた．堀田等は，複数軌道系のバンド構造においてトポロジカルな効果が存在することを示している[13]．

また，軌道は1種類であっても，多くの準位を考えたときに，Berry の位相について特別な考慮が必要になる場合がある．上で解説した量子ホール効果をもう一度見てみよう．2次元系に周期構造，例えば正方格子構造があるとしよう．すると，磁場の関数としてのエネルギー・スペクトルは，図6(a)に示すようなフラクタル（Hofstadter 蝶）になる．磁場が弱いとき（図の左端近傍）では，扇状の一連の線束が左下（および左上）から広がっているのが見えるが，これは普通のランダウ準位で，蝶をなすメインなギャップはこれらランダウ準位の間の隙間である．この各隙間がトポロジカル量子数（量子化されたホール伝導度）をもっている．一方，最近，蜂の巣格子上での量子ホール効果が大きな話題となっている．蜂の巣格子は，単位胞に原子が2個ある非 Bravais 格子であり，バンドは2枚ある．これが，蜂の巣対称性のために，Brillouzon の端で丁度円錐が頂点を付き合わせる形をとる．バンド分散構造としては，質量がゼロのディラック粒子と同じである．このため，様々な異常が発生するが，特に磁場中では特異な量子ホール効果が生じる．ここで詳述する紙幅はないが，最近，1枚の蜂の巣格子が，グラファイトを引き剥がすことにより実験的に用意することができ，特異な量子ホール効果も観測されて，物性物理におけるホットな話題をさらっている[14]．

この zero-mass Dirac cone が起きる場所は，電子・正孔対称性から，丁度 $E=0$ である．これに磁場をかけると，電子のランダウ量子化と正孔のランダウ量子化が $E=0$ で干渉し，特異なランダウ準位が $E=0$ に発生する．これがまた，特異なトポロジカル量子数を生む，というのが特異な量子ホール効果を一口で説明したものである．Hofstadter 蝶で言えば，蜂の巣に対してはこれが $E>0$ と $E<0$ で対称になり，$E=0$ にも蝶の一翼があることに対応する（図6(b)）．すると，この $E=0$ 近傍でトポロジカル量子数を計算したいが，これは厄介である．というのも，バンドのど真ん中にあるから，下から順々にこの量子数を計算し，$E=0$ 近傍まで足し上げねばならない．最近，初貝等は，これを，次のような方法で実行した[14]．まず，普通の量子ホール・トポロジカル量子数（Chern 数）を次のように拡張する．波動関数 $\varphi_j(\boldsymbol{k})$ を，最低エネルギー $\epsilon_1(\boldsymbol{k})$ をもつものから，$E=0$ 近傍を経て最高エネルギー $\epsilon_{2q}(\boldsymbol{k})$ をもつものにわたって考えよう（$2q$ は蝶の羽をなすバンドの数）．すると，これらについて Berry のゲージ・ポテンシャルは

$$(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k}))_{ij} = \boldsymbol{\varphi}_i^\dagger(\boldsymbol{k})\nabla_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{\varphi}_j(\boldsymbol{k}), \quad (1 \le i, j \le n) \tag{5}$$

（ここで $\boldsymbol{A}_{ij}(\boldsymbol{k})$ は反エルミートな $n\times n$ 行列，n は，今考えているフェルミ・エネルギー E_F 直下のバンド指数）．すると，Chern 指数は，このゲージ・ポテンシャルから，

$$\sigma_{xy}(E_F) = \frac{1}{2\pi i}\int \mathrm{Tr}\; dA \tag{6}$$

（ここで $A(\boldsymbol{k}) \equiv A_\mu(\boldsymbol{k})dk_\mu$ は微分形式で言うところの one-form）で与えられる．この定式化は，Berry の位相の，non-Abelian な拡張になってい

る[15]．必要以上に複雑化したような印象があるかもしれないが，こうやっておくと，E_F の下に多数のバンドがあり，それらにわたるトポロジカル量子数の足し算を強いられる場合に楽になる．実際の計算には，格子ゲージ理論で開発されたトポロジカル量子数の精度良い計算法を，non-Abelian なポテンシャルに対するリンク変数に適用することができる．非可換 Berry 位相については，本特集では初貝氏により解説されている．

5. 非平衡過程における位相

普通に考える Berry の位相は，すべて**断熱過程**，つまりものごと（ハミルトニアンに含まれるパラメータ）を限りなくゆっくり変化させたときの話である．これを有限の速さで変えると，断熱定理はもはや成り立たず，準位間の量子遷移が起きる．このときに Berry の位相はどうなるだろうか，もはや定義もできないだろうか．実は，定義できることが知られている．まず，Aharonov–Anandan[16] が，ある条件（例えば，射影された Hilbert 空間での閉じた軌跡を考える場合）には，非断熱過程でも幾何学的位相を考えることができることを示した．その後，萱沼[17]が，具体的に 2 準位系についてこれを示し，Berry の位相に対応するものを具体的に計算した．2 準位系の場合，その間の Landau–Zener トンネリングは Weber 関数で表されるが，この位相は，微分方程式論で Stokes 位相として知られるものに一致する．

このような非平衡現象は興味深い．例えば，バンド・ギャップがあり，E_F がギャップ内にあるときはバンド絶縁体であるが，これに十分強い電場をかけると，絶縁破壊が起きる．岡等によると，これは，量子準位間（今の場合価電子帯と伝導帯の間）の非断熱トンネリングとして捉えることができる（図 7）[18]．つまり，外場は今の場合強電場に対応するベクトル・ポテンシャルとすると，弱電場はバンドを断熱的にたどる場合，強電場は非断熱的にたどる場合で，このときには，Landau と

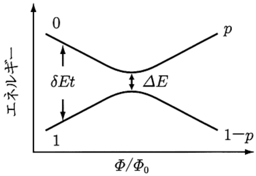


図 7　Landau–Zener トンネリング．縦軸はエネルギー，横軸は，外部電場を時間依存（$\propto \Phi(t)$）ベクトル・ポテンシャルで表現したときの Φ．初期（図の左）に下の準位 $|0\rangle$ に確率 1 でいた状態は，トンネリング後に確率 p で上の準位 $|1\rangle$ に移る[18]．

Zener により昔議論されたように，準位間の遷移が起きる．このような強い電場下の非線形輸送を，「幾何学的位相」の観点から捉え直すこともできる．すると，強電場下での基底状態が崩壊する確率の式が，QED における真空の崩壊確率の Schwinger 公式と形式的に一致すること，また有効作用が，最近定式化された分極に対する Berry 位相公式を非断熱過程に拡張したもの（上記の Stokes 位相）になっていることが分かる．つまり，図 7 で，左端の確率分布と右端のを結びつける転送行列を

$$U = \begin{pmatrix} \sqrt{p}e^{i\beta} & \sqrt{1-p}e^{i\gamma} \\ -\sqrt{1-p}e^{-i\gamma} & \sqrt{p}e^{-i\beta} \end{pmatrix} \quad (7)$$

とすると，対角要素に現れる β が力学的位相，非対角要素に現れる γ が幾何学的（Stokes）位相である．このような解析は，モット絶縁体のような強相関系に拡張することもできる[18]．

6. おわりに

以上で，物理学における位相を概観した．「位相」には phase と topology という二義がある，ということから始めたが，局所的な phase が，場合によっては大局（topology）まで支配する，というのが面白い．位相は今後も物理学の fascination であり続けるであろう．

位相については，江口徹，倉辻比呂志，初貝安

弘，岡隆史，Yshai Avishai の各氏との議論に感謝したい．

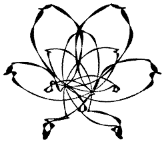
参考文献[編注]

1) N. Tsuji, S. Takajo and H. Aoki, *Phys. Rev. B*, in press.
2) 青木秀夫：数理科学 1991 年 11 月号，p.11（別冊・数理科学「場の理論」（サイエンス社，1999），p.107 に再録）．
3) Michael Berry は色々と面白い研究をしていて，ブリストル大学の homepage（http://www.phy.bris.ac.uk/）の彼のページを見ると解説されている．
4) F.D.M Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1788 (1987).
5) 青木秀夫：数理科学 2004 年 2 月号，p.22.
6) D.J. Thouless, M. Kohmoto, P. Nightingale and M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett* **49**, 405 (1982).
7) B.I. Halperin, *Jpn. J. Appl. Phys. Suppl.* **26**, 1913 (1987); M. Kohmoto *et al*, *Phys. Rev. B* **45**, 13488 (1992).
8) M. Koshino *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1062 (2001); *Phys. Rev. B* **65**, 045310 (2002); **66**, 081301(R) (2002); **67**, 195336 (2003).
9) 青木秀夫，川上則雄，永長直人（編）：物理学論文選集「物性物理における場の理論的方法」（日本物理学会，1995）．
10) 中島龍也，青木秀夫：『分数量子ホール効果』（東京大学出版会，1999）．
11) S.D. Sarma *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 166802 (2005); C. Day, *Phys. Today* **58**, 21 (2005).
12) G. Moore and N. Read, *Nuc. Phys. B* **360**, 362 (1991).
13) T. Hotta *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2477 (2000); *Rep. Prog. Phys.* **69**, 2061 (2006).
14) Y. Hatsugai, T. Fukui and H. Aoki, *Phys. Rev. B* **74**, 205414 (2006) およびそこの文献．
15) Y. Hatsugai, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 2604 (2004); **74**, 1374 (2004).
16) Y. Aharonov and J. Anandan, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1593 (1987).
17) Y. Kayanuma, *Phys. Rev. A* **55**, R2495 (1997).
18) T. Oka *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 066406 (2003); **94**, 100602 (2005); **95**, 137601 (2005).

（あおき・ひでお，東京大学大学院理学系研究科）

編集部注）弊社ホームページに，著者の「名著に親しむ」が掲載されておりますので，合わせてご覧下さい．

ベリー位相とスピン



村上 修一

ベリー位相[1]とは，系があるパラメタ群に依存している場合を考え，パラメタ群をある経路にそって断熱的に一周させたときに，量子状態の波動関数に加わる位相であり，経路の幾何学的な性質によってのみ決まるため「幾何学的位相」とも呼ばれる．どのような系を考えるか，またその系のどのパラメタを考えるかによって多種多様な物理現象にこのベリー位相が現れ，それについては文献 2, 3) に詳しい．電子の運動に関しては，ベリー位相は量子ホール効果や異常ホール効果など種々のホール効果に現れるが，本記事では中でもスピンホール効果[4~6]について解説を行う．

1. スピンホール効果とは

スピンホール効果とは外部電場 $\boldsymbol{E}$ に垂直向きにスピン流が誘起される効果で，線型応答の範囲では

$$j_j^i = \sigma_s \epsilon_{ijl} E_l \tag{1}$$

と表される（図 1）．j_j^i $(i, j = x, y, z)$ はスピン流演算子であり，$+i$ 向きのスピンが $+j$ 向きに，$-i$ 向きのスピンが $-j$ 向きに流れるような純粋スピン流を表す．この演算子は大まかにはスピン S^i と速度 v_j の積であり，時間反転に対して符号を変えない．そのためスピンホール伝導率 σ_s も時間反転で符号を変えないので，ゼロ磁場，非磁性であっても電場のみでスピン流を誘起できることになり，興味深い．通常はこうした時間反転の保たれている（ゼロ磁場で非磁性）場合に限りスピンホール効果を考える*1)．スピンホール効果は，最初 p 型半導体[7]（p-GaAs）やヘテロ構造 n 型半導体[8]について提唱され，最近盛んに研究されている．これとベリー位相との関係を以下に解説しよう．

*1) 時間反転が破れたとき，例えば強磁性体では異常ホール効果が出てスピンホール効果と共存し，スピン流は電流を伴う．時間反転が保たれたときには純粋（＝電流を伴わない）スピン流である．

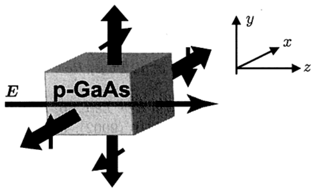


図 1　スピンホール効果の模式図．$+z$ 向きの電場 $\boldsymbol{E}$ により，$+x$ 向きのスピンが $+y$ 向きに，$-x$ 向きのスピンが $-y$ 向きに出る．

2. ベリー位相と半古典的運動方程式

このベリー位相は，パラメタを一周させたときの，初期値での位相と終値での位相とを比較している．初期値と終値とはパラメタの値が一緒であるため固有状態としては（全体の位相以外は）同じであり，そのために位相の違いが意味を持つのである．逆に，異なるパラメタの値では固有状態も異なるため，それらの位相は比較しようがない．各パラメタに対し波動関数の位相は任意に選ぶことができ，これをゲージの自由度と呼ぶ．異なる状態の位相差はゲージに依存するので物理的には無意味であるが，物理的に同じ状態の位相差はゲージによらないため，物理量になり得る．簡単な例を挙げると，2 つのベクトル

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_2 = \begin{pmatrix} 2i \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

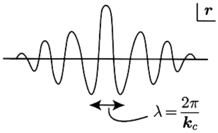


図 2　波束.

の位相差は定義できない．なぜなら例えば第一成分の比を考えるか，第二成分の比を考えるかで位相差が異なるからである．他方，2 つのベクトル

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_3 = i\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} 2i \\ i \end{pmatrix} \tag{3}$$

は比例するため位相差を定義できて，$\pi/2$ である．このためベリー位相はパラメタ空間で一周していないと定義できない．ではスピンホール効果では，電子は一周して元に戻っていないではないかという疑問が出るが，その答えは後述する．

ベリー位相は波動の位相のずれとして現れるのはもちろんであるが，他の例として波束の位置のずれとして現れ，これが本記事のテーマである．まず空間的に局在した波である波束を考える（図 2）．こうした波は，波数 $\boldsymbol{k}_c$ を中心とした幅 Δk の範囲の波の重ね合わせである．実空間での波束の中心は波束を構成する平面波の干渉で決まるので，波束が伝播する際に波数が（断熱的に）変化すると，ベリー位相の効果で干渉パターンが変わり，波束の中心が一般にシフトする．

これは電子でも光でも波動一般に言えることであり，光については本特集号の小野田勝氏の解説を見ていただきたい．ここでは電子に限って，この現象の原理と物理的帰結を解説する．ベリー位相の効果を含む電子の半古典的運動方程式は

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_n(\boldsymbol{k})}{\partial \boldsymbol{k}} - \dot{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k}), \tag{4}$$

$$\hbar\dot{\boldsymbol{k}} = -e(\boldsymbol{E} + \dot{\boldsymbol{x}} \times \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x})) \tag{5}$$

という形である[9]．ここで n はバンドを表す添字，また $\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k}) = \nabla_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{k})$ であり，この $\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{k})$ は，$u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$ を Bloch 波動関数 $\phi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$ の周期的な部分として，

$$A_{ni}(\boldsymbol{k}) = i\left\langle n\boldsymbol{k}\left|\frac{\partial}{\partial k_i}\right|n\boldsymbol{k}\right\rangle \equiv i\int_{\text{unit cell}} u^{\dagger}_{n\boldsymbol{k}}\frac{\partial u_{n\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}d^dx \tag{6}$$

と書け，これがベリー位相に対応する．この $\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k})$ と $\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{k})$ はそれぞれ，磁場とベクトルポテンシャルと同様の数学的構造を持つ（しかし実際の磁場とは直接は関係していない）．この $\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k})$, $\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{k})$ を，微分幾何ではそれぞれ曲率，接続，また場の理論ではそれぞれ場の強さ，ゲージ場と呼ぶ．波動関数 $u_{n\boldsymbol{k}}$ の位相を各 $\boldsymbol{k}$ について独立に選べる（$u'_{n\boldsymbol{k}} = e^{i\theta(\boldsymbol{k})}u_{n\boldsymbol{k}}$）ために，$\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{k})$ は，ゲージ変換 $\boldsymbol{A}'_n(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{k}) + \nabla_{\boldsymbol{k}}\theta$ の自由度があるが，$\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k})$ はゲージによらない．物理的には，例えば電場がかかっていると波数が時間変化するため，(4) 式の右辺第 2 項から，電子の速度に電場に垂直な成分が加わる．つまりホール効果として観測される．こうした理論は異常ホール効果の議論[10,11]で 1950 年代から登場していたが，量子ホール効果[12]やベリー位相[1]の研究を発端とし最近盛んに研究され，スピンホール効果もこの効果による．

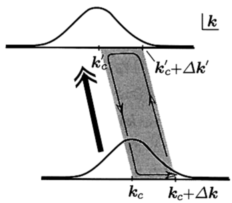


図 3　波束の運動とベリー位相.

ベリー位相の項が $\dot{\boldsymbol{x}}$ に入ってくる理由を見るために，波束を平面波の重ね合わせ

$$\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \int f(\boldsymbol{k})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{k} \tag{7}$$

として書こう．$f(\boldsymbol{k}) \sim \exp(-a^2|\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_c|^2)$ は波数が $\boldsymbol{k}_c$ を中心に分布していることを表す．この波束が媒質中を伝播する際，波束の中心波数が $\boldsymbol{k}_c$ から $\boldsymbol{k}'_c$ に変化する場合（図 3）を考えると，$f(\boldsymbol{k})$ 自身がベリー位相を獲得する．その形を $f(\boldsymbol{k}) \propto e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}$ と書くと，このベリー位相の効果で干渉パターンが変わり，波束の中心が $\boldsymbol{R}$ だけずれる．ここでのベリー位相は，図 3 の灰色の部分のループに沿った位相のずれであり，電子が $\boldsymbol{k}$-空間を一周しなくてもベリー位相の効果が出る．

3. 半導体におけるスピンホール効果

ベリー位相による電子の位置のシフトについて解説してきたが，実際どのようにホール効果が現れるかは，実際に $\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k})$ を計算してみると良く分かる．例えば

強磁性体では平均的に $(B_n)_z > 0$ になっており，電子の運動は電場に垂直向きにシフトし異常ホール効果が出る．一方時間反転対称性を保った場合，つまりゼロ磁場で非磁性体の場合は，上向きスピンと下向きスピンとでちょうど $\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k})$ が反対向きになっている．つまり上向きスピンと下向きスピンとで逆向きのホール流が生じることになり，これがスピンホール効果となる．

スピンホール効果がどのように出るか具体的に見るため，例を挙げて $\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k})$ を Bloch 波動関数から計算してみよう．どのようなバンド構造が有利かと考えるため，$\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k})$ の表式を書き直す．

$$\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k}) = i\varepsilon_{ijk} \times \sum_{m(\neq n)} \frac{\left\langle n\boldsymbol{k} \left| \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{k}} \right| m\boldsymbol{k} \right\rangle \times \left\langle m\boldsymbol{k} \left| \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{k}} \right| n\boldsymbol{k} \right\rangle}{(E_n - E_m)^2}. \quad (8)$$

ここではエネルギーに縮退がないとしたが，縮退がある場合へも拡張でき，その際はゲージ場は non-Abelian になる．この表式の分母はエネルギー差の 2 乗であるため，2 つの状態のエネルギーが近接すると $\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k})$ は大きく，特にバンドどうしがある波数 $\boldsymbol{k}$ で縮退するとそこで発散的に増大する*2)．

様々な物質の中から探すと，典型的な半導体（Si, Ge, GaAs, InSb など）の価電子バンドがこういった構造を持つことが分かる．バンド構造は模式的に図 4 に示すように，価電子バンドは 2 個の 2 重縮退バンド（重い正孔バンドと軽い正孔バンド）からなり，$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$ で 4 重縮退している．これら 4 バンドを表すラッティンジャー模型[13]という模型が知られており，3 つのパラメタ $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ を含む．ここでは簡単のため $\gamma_2 = \gamma_3$ と近似すると，バンド構造は $\boldsymbol{k}$ 空間で等方的になって (spherical 近似と言う)，ハミルトニアンは

$$H = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2\right)k^2 - 2\gamma_2(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{S})^2\right] \quad (9)$$

($\boldsymbol{S} = (S_x, S_y, S_z)$ はスピン 3/2 行列) と表される．$\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k})$ の計算にはこのハミルトニアンを対角化する必要があるが，それにはヘリシティ $\lambda = \frac{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{S}}{k}$ を対角化すればよく，それはスピン量子化軸を $\hat{k} = \boldsymbol{k}/k$ 方向に取り直せばよい．ヘリシティ λ の固有値は重い正孔バンド（HH），軽い正孔バンド（LH）についてそれぞれ，

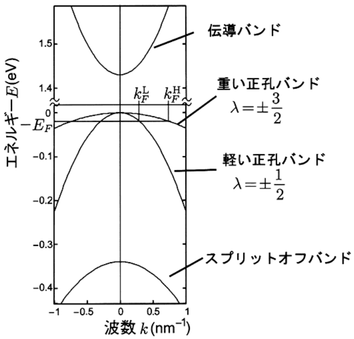


図 4　GaAs のバンド構造の模式図．立方晶 ($\bar{4}3m$) の異方性は，spherical 近似により無視した．

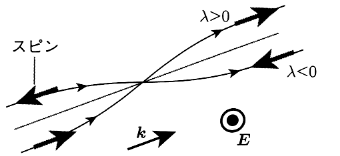


図 5　ベリー位相を含めた半古典的運動方程式に基づいた正孔の軌跡．電場 $\boldsymbol{E}$ に垂直な方向の運動のみ示す．スピン（灰色矢印）が $\boldsymbol{k}$ の向きと平行か反平行かで，正孔の軌跡のずれ方が反対になる．

$\lambda_{\rm HH} = \pm\frac{3}{2}$ および $\lambda_{\rm LH} = \pm\frac{1}{2}$ であり，エネルギーは $E_{\rm HH} = \frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2m}\hbar^2 k^2$ と $E_{\rm LH} = \frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2m}\hbar^2 k^2$ となる．このヘリシティ λ はバンドのラベルと見なせる．

対応する固有ベクトルを用いると $\boldsymbol{B}_\lambda(\boldsymbol{k}) = \lambda(2\lambda^2 - \frac{7}{2})\boldsymbol{k}/k^3$ が得られ，$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$ にあるモノポール（磁気単極子）から等方的に放射されている場の形をしている．モノポールが $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$ にあるのは 2 つのバンドがこの点で縮退するためである．一様定電場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{E}$ をかけた場合を考えると，$\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{x}$ の時間発展を表す連立微分方程式が書き下せて，これを解析的に解くと，$\boldsymbol{x}$ 空間での軌跡は図 5 のようになる．この図では $\boldsymbol{E}$ に垂直な方向の正孔の運動を示す．ベリー位相の項 ($\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k})$) がないと $\boldsymbol{k}$ 方向に直線運動するが，ベリー位相項により電場と $\boldsymbol{k}$ の両方に垂直な方向に軌跡がシフトする．そのシフトはヘリシティ $\lambda = \hat{k}\cdot\boldsymbol{S}$ の符号（$\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{S}$ とが平行か反平行か）が変わると反対向きになる．つまり逆向きのスピンは逆向きに軌跡がシフトする．こ

*2)　実際は縮退にも種類があり，例えば Dirac fermion 的な分散なら縮退点で $\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k})$ は発散するが，後述する重い正孔バンドでは，すべての $\boldsymbol{k}$ で縮退していても $\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{k})$ は発散しない．

のシフトはスピンに垂直であり，これがまさにスピンホール効果を表している．このシフトをすべての充填された正孔の状態について足すと，スピン流が計算できる．その結果，絶対零度において電場 $\boldsymbol{E}$ を l 軸方向にかけたとき，i 軸向きのスピンが j 軸の向きに流れるスピン流 j_j^i は

$$j_j^i = \frac{e}{12\pi^2}(3k_F^{\mathrm{H}} - k_F^{\mathrm{L}})\epsilon_{ijl}E_l \tag{10}$$

となり，(1) 式の形になっている．$k_F^{\mathrm{H}}, k_F^{\mathrm{L}}$ はそれぞれ重い正孔バンド，軽い正孔バンドのフェルミ波数である．なおこの計算は半古典近似の下での計算であり，実際は速度とスピンとは可換でないため，特定のスピンを持つ正孔が特定の速度を持つという描像は量子力学的には成り立たない．また不純物散乱が強くなるとスピン流も影響を受ける．こうした点については様々な研究があるが[5]，上記の半古典的な見積もりでも，p 型半導体の場合ではオーダーは正しく計算できる[14]．

以上の理論は不純物散乱によらず，固体のバンド構造に由来するため，「内因性スピンホール効果」と呼ばれる．これは 2003 年に我々のグループ[7] とテキサス大学のグループ[8]で同時に独立に提唱された．実は 1970 年代にスピンホール効果の理論的予言[15]があるが，それは不純物散乱によるスピンホール効果（外因性スピンホール効果）であり，効果が小さく計算で見積もりにくい，実験的に不純物の状態を観測・制御しにくい等の理由で，あまり興味を持たれなかった．内因性スピンホール効果は，実験的報告もありスピントロニクスへの応用の可能性もあって，注目されている．最近の研究については総説[4~6]を参照頂きたい．

スピンホール効果で発生したスピン流が試料の端に達するとそこで蓄積するが，それにより化学ポテンシャルが高くなるため，スピンが逆向きに拡散し始める．またスピンはスピン軌道相互作用のために，それ自身でも向きを変えてしまう（スピン緩和）ので，結局はスピン流と，スピン拡散・緩和がつりあって定常状態に達する．加藤ら[16]は，n-GaAs でのスピン蓄積をカー効果を用いて観測した．直線偏光ビームを試料に当てると，その点のスピン蓄積量に応じて偏光面が回転するため，その回転角を測定してスピンホール効果を観測した．他方，Wunderlich[17] らはスピン LED と呼ばれる構造で測定を行った．p 型半導体でスピンホール効果によりスピン偏極したホールの流れを作り，それが隣接した n 型半導体に流れ込み，ホールと電子が再結合する際に円偏光が出るもので，その円偏光度からスピン偏極度が分かる．

また金属系では半導体と違い光学的にスピンを測定できないので，電気的に測定することになる．Al については Valenzuela ら[18]，Pt については木村ら[19]は，スピン流を強磁性体電極を用いて作り出し，それを試料中に注入した際に横向きに発生する電場を測定している（逆スピンホール効果）．ここでは強磁性体による試料の異常ホール効果を排除するために非局所的方法でスピン注入を行っている．また齋藤ら[20]はスピンポンピングによりスピンを注入して逆スピンホール効果を測定している．Pt[19, 20] ではスピン軌道相互作用が大きく，室温でも十分観測にかかる．

4. スピントロニクスへの応用

現在のエレクトロニクス技術は半導体物理に基づいている．半導体では金属と違い，外的にキャリアを制御しやすいために様々な機能をもったデバイスを作ることができるという特長がある．エレクトロニクスにおいては，電子は電荷としてのみ扱われている．一方，電子の持つスピンの自由度を用いて，より高性能，高機能，低消費電力のデバイス設計を目指す分野がスピントロニクスである．スピントロニクスデバイスの提案はいろいろあり，金属系では実現されているものもある．しかし半導体系では実現に至っていない．半導体スピントロニクスデバイスでは，半導体中にスピンを注入し，操作し，それを検出するというステップが必要になる．しかし半導体中へのスピン注入が高い効率でできないのが困難の一つである．非磁性半導体中には上向き，下向きスピンが同数ずつあり，そのスピンの向きのバランスを崩して，例えば上向きスピンを多く導入することが必要であるが，それが効率よく行えない困難がある．

スピンの向きはいわば電子についたラベルである．電子をゴマに譬えれば，上向きスピンと下向きスピンは白ゴマと黒ゴマのようなものである．違うのは色だけで，混合物の入った容器を振っても 2 種類を分けることはできない．スピントロニクスで必要なのは例えば上向きスピン（白ゴマ）の多いものである．しかし通常の非磁性体は上向き（白ゴマ），下向きスピン（黒ゴマ）が同数ずつあるので，容器を振ってもこの 2 種類のゴマは同数ずつ出てくる．そこで，最初から上向きスピン（白ゴマ）のほうが多い物質，つまり強磁性体を使うことを考えつく．つまり強磁性体を半導体に接合

して電流を流してスピンを注入すればよいが，ここにも問題がある．強磁性体として金属を用いると，金属と半導体との伝導率の大きな違いのためにスピン偏極率が界面でほとんど失われる[21]．(Ga, Mn)As 等の強磁性半導体を用いると効率は向上するが，こうした強磁性半導体はまだ室温よりもキュリー温度が低く，さらに研究が必要である．さらに，磁場は局所化するのが難しいため，高集積化にも課題が残る．スピンホール効果はこの点，半導体を用いていて，しかも磁場を使わないので好都合である．これは先ほどの譬えでは，「白ゴマ」と「黒ゴマ」のベリー位相が逆符号なため，電場印加により自然に分離することに相当する．スピンホール効果はスピン軌道相互作用に基づいており，物質によってはかなり大きいため，室温での効率よいスピン注入に向けて研究が進められている．

5. 量子スピンホール効果

最近，量子ホール効果のスピン版とも言える「量子スピンホール効果」が理論的に提唱され注目を集めている．整数量子ホール効果では強磁場下でランダウ準位ができており，そのときバルクには電流が流れず，系のエッジに一つの向きにのみ電流を流す状態が出て，この電流は不純物等で後方散乱されない（図 6 (a)）．

このエッジ電流を上向き，下向きスピンで逆方向にして重ね合わせたものが量子スピンホール状態と言える（図 6 (b)）．バルクにはフェルミエネルギー上に状態がなく，エッジにのみ状態がある．時間反転対称性が保たれた（ゼロ磁場で非磁性）状況であるため，エッジ状態はスピン方向と流れる方向が互いに逆の 2 状態がペアをなし（Kramers 縮退），純粋スピン流を担う．

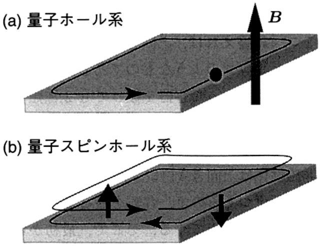


図 6　(a) 量子ホール効果と (b) 量子スピンホール効果におけるエッジ状態.

このエッジ状態は非磁性不純物に対して安定であり，後方散乱されない．つまりエッジが金属状態になっている．

こうしたエッジ状態は，バルクの状態のトポロジカルな秩序に由来する．非磁性の絶縁体には Z_2 トポロジカルナンバー[22]（偶奇もしくは ±1）を対応させることができる．これが偶の状態は通常の絶縁体であるが，奇の状態は量子スピンホール系であり，系の境界に必ずスピン流を担うエッジ状態のペアが出る（図 6 (a)）．こうした状態は 2 次元でも 3 次元[23]でも存在し，いくつかの理論的提案がある[23,24]．量子ホール状態は数 T の強磁場を必要とするのに対し，量子スピンホール状態はゼロ磁場，非磁性絶縁体なので，実は量子スピンホール状態が実現しているものが自然に存在しているかも知れない．

6. おわりに

スピンホール効果を理解するのにベリー位相という概念は必要不可欠であるかというと，答えは否である．例えば線型応答の範囲では久保公式でスピンホール伝導率を計算したり，また Landauer–Büttiker 公式でメゾスコピック系でのスピンホール伝導度を計算したり等の研究が多数行われていて，ベリー位相を用いないで計算ができる．

ではベリー位相は何の役に立つのかだが，これはむしろ様々な研究分野をつなぐ横糸の役割を果たすのであろうと思われる．個々の研究分野では必要なくとも，様々な分野での一見全く関係なさそうな物理現象をくくる枠組みとして「ベリー位相」が生きてくる．我々が内因性スピンホール効果の着想に至ったのも，「ベリー位相」という見方で電子輸送現象を見直すことができたからであった．このように違った視点を提供して新しい着想をもたらす点で，ベリー位相という見方が有用になるのである．

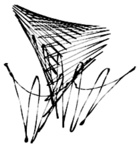
参考文献

1) M.V. Berry, *Proc. R. Soc. London* **A392** (1984) 45.
2) A. Shapere and F. Wilczek, " Geometric Phases in Physics" (1989), World Scientific.
3) A. Bohm *et al.*, "The Geometric Phase in Quantum Systems" (2003), Springer.
4) 村上修一，永長直人，固体物理 **39** (2004) 27; 応用物理 **75** (2006) 342.

5) 村上修一，日本物理学会誌 **62** (2007) 2.
6) H.-A. Engel, E.I. Rashba, B.I. Halperin, cond-mat/0603306.
7) S. Murakami, N. Nagaosa, and S.C. Zhang, *Science* **301** (2003) 1348.
8) J. Sinova *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 126603.
9) G. Sundaram and Q. Niu, *Phys. Rev. B* **59** (1999) 14915.
10) R. Karplus and J.M. Luttinger, *Phys. Rev.* **95** (1954) 1154.
11) 永長直人，日本物理学会誌 **59** (2004) 520; N. Nagaosa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75** (2006) 042001.
12) D.J. Thouless, M. Kohmoto, M.P. Nightingale, and M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* **49** (1982) 405.
13) J.M. Luttinger, *Phys. Rev.* **102** (1956) 1030.
14) S. Murakami, *Phys. Rev. B* **69** (2004) 241202 (R).
15) M.I. Dyakonov and V.I. Perel, *JETP Lett.* **13** (1971) 467; *Phys. Lett.* **A35** (1971) 459.
16) Y.K. Kato, R.C. Myers, A.C. Gossard and D.D. Awschalom, *Science* **306** (2004) 1910.
17) J. Wunderlich, B. Kästner, J. Sinova and T. Jungwirth, *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 047204.
18) S.O. Valenzuela, M. Tinkham, *Nature* **442** (2006) 176.
19) T. Kimura, Y. Otani, T. Sato, S. Takahashi, S. Maekawa, cond-mat/0609304.
20) E. Saitoh, M. Ueda, H. Miyajima, G. Tatara, *Appl. Phys. Lett.* **88** (2006) 182509.
21) G. Schmidt *et al.*, *Phys. Rev. B* **62** (2000) R4790.
22) C.L. Kane and E.J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 146802, 226801.
23) L. Fu and C.L. Kane, cond-mat/0611341.
24) S. Murakami, *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 236805.

（むらかみ・しゅういち，東京大学大学院工学系研究科）

光波束の動力学と幾何学的位相



小野田　勝

1. はじめに

本稿では電磁波から作った波束（光波束）の運動における幾何学的位相の効果について述べる．波束の拡がりに比べてずっと大きな尺度で眺めてみると，このような状態は粒子のごとく見えるが，古典力学における質点との違いはどのように現れるのであろうか．波束の運動を解析することはそれほどたやすいことではない，原理的には無限自由度の波動方程式を解かなければならないからである．そこで波束を粒子と見立て，何とか有限個の変数（例えば中心座標など）を通して質点との本質的な違いを理解したい．量子力学によれば，解析力学における作用とは波動関数の位相と対応しており，古典的粒子の運動はこの作用が停留値をとる軌跡として導かれる．実は波動光学から幾何光学の方程式を導出する際にも，同様の対応関係が見られる．最も単純な平面波の位相は $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-E_{\boldsymbol{k}}t$（$\boldsymbol{k}$: 波数ベクトル，$E_{\boldsymbol{k}}$: エネルギー分散）で与えられるが，波動場が内部自由度をもっている場合にはこの限りでなく，Berry 位相と呼ばれる幾何学的位相が現れる[1)]．電磁波は偏光に関する内部自由度をもつので，この自由度に附随する幾何学的位相が波束の運動に影響を与えることは想像に難くないであろう．このことを考慮しつつ，波束を粒子描像から捉えた運動方程式とその動力学について概観したあと，このような描像の適用性と限界について見ていくことにする．

2. 波束の運動方程式

まずは以下の Schrödinger 型の波動方程式に従う波束を一般的な立場から考えてみよう．

$$i\frac{d}{dt}|\Psi\rangle = \mathcal{H}|\Psi\rangle. \tag{1}$$

量子力学の場合，$|\Psi\rangle$ は量子力学的波動関数，$\mathcal{H}$ はハミルトニアンであり，Schrödinger 方程式そのものである．電磁場に対しては，誘電率テンソル ϵ および透磁率テンソル μ が座標のみの関数として近似できる場合は，$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\epsilon^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{E}, \mu^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{H})^T$ と次式より Maxwell 方程式の書き換えになっている．

$$\mathcal{H}=\begin{pmatrix} 0 & i\epsilon^{-\frac{1}{2}}p_h\mu^{-\frac{1}{2}} \\ -i\mu^{-\frac{1}{2}}p_h\epsilon^{-\frac{1}{2}} & 0 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

$$p_h=-i\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{S}, \quad [S_i]_{jk}=-i\epsilon_{ijk}. \tag{3}$$

ここで，ϵ_{ijk} は完全反対称テンソル．

波動方程式 (1) が解ければ，波束の運動も詳細に分かることになるが，問題を置き換えて次式（を時間積分したもの）の停留値問題を考えてみる．

$$\mathcal{L} = \left\langle \Psi \middle| i\frac{d}{dt} - \mathcal{H} \middle| \Psi \right\rangle. \tag{4}$$

この量は波動関数 $|\Psi\rangle$ が厳密なものであれば，$\mathcal{L}=0$ でなければならない．ここでは中心座標と中心運動量に対応する変数 $\boldsymbol{r}_c$ と $\boldsymbol{k}_c$ を用いて試行関数を構成し，$\mathcal{L}$ の停留値問題を考えることにより，波束の運動を理解しようというわけである．また偏極状態などの内部自由度に縮退がある場合は，その自由度に対応した変数の組 $\{z_{c\lambda}\}$（λ: 縮退状態の指標，$\sum_\lambda |z_{c\lambda}|^2=1$）を導入する．少々天下り的ではあるが，摂動がなく系が周期的である場合の解とその固有エネルギー $E_{n\boldsymbol{k}}$（n: バンド指標）は分かっているものとして，動的位相因子 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-iE_{n\boldsymbol{k}}t}$ を除いた部分を $\langle\boldsymbol{r}|u_{n\lambda\boldsymbol{k}}\rangle$ と表すことにする．次に，$|u_{n\lambda\boldsymbol{k}}\rangle$ を参考にして，摂動の下で $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_c$ 近傍において良い近似解となり，エネルギーの近似値 $\mathcal{E}_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{r}_c}$ をもつ $|u_{n\lambda\boldsymbol{k};\boldsymbol{r}_c}\rangle$ を構成する．例えば電子系に

おいて摂動として弱磁場（$\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{r}}$: ベクトルポテンシャル）を考えた場合，$\langle \boldsymbol{r}|u_{n\lambda\boldsymbol{k};\boldsymbol{r}_c}\rangle = e^{-ie\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{r}_c}\cdot\boldsymbol{r}}\langle \boldsymbol{r}|u_{n\lambda\boldsymbol{k}}\rangle$ のような関数を考えることを意味する．

一般的には摂動により縮退が解ける可能性があるが，簡単のために縮退の分裂が無視できるとして，以下の試行関数を考えてみよう．

$$\langle \boldsymbol{r}|W\rangle = \int \frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3} w_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}_c} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-i\theta_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{r}_c;t}} \times \sum_{\lambda} z_{c\lambda}\langle \boldsymbol{r}|u_{n\lambda\boldsymbol{k};\boldsymbol{r}_c}\rangle. \qquad (5)$$

ここで $|w_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}_c}|$ は $\boldsymbol{k}\sim\boldsymbol{k}_c$ 近傍にピークをもち，κ 程度の拡がりをもつ関数である．（したがって実空間における拡がりは $1/\kappa$ 程度．）また $\int \frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}|w_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}_c}|^2 = 1$ および $\int \frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}|w_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}_c}|^2\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_c$ を満たすものとする．（電磁場の場合は，複素共役な部分を加えて全体として実関数とする．）

波束の中心座標を評価すると，以下の関係を満たさなければいけないことが分かる．

$$\boldsymbol{r}_c \cong \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}_c}\theta_{\boldsymbol{k}_c;\boldsymbol{r}_c;t} - (z_c|\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}_c}|z_c), \qquad (6)$$

$$[\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}}]_{\lambda\lambda'} = -i\langle u_{n\lambda\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}u_{n\lambda'\boldsymbol{k}}\rangle. \qquad (7)$$

ここで $|z_c)$ は $\{z_{c\lambda}\}$ をベクトル表示したものであり，$|u_{n\lambda\boldsymbol{k}}\rangle$ は $\langle u_{n\lambda\boldsymbol{k}}|u_{n\lambda'\boldsymbol{k}}\rangle = \delta_{\lambda\lambda'}$ と規格化されているとした．式 (7) で定義される $\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}}$ は Berry 接続と呼ばれ $|u_{n\lambda\boldsymbol{k}}\rangle$ の幾何学的位相を反映して，第 2 項の補整をもたらす．この関係式を使って，式 (4) の $|\Psi\rangle$ を $|W\rangle$ で置き換えたものを計算すると次式が得られる[2,3]．

$$\mathcal{L} \cong (\boldsymbol{k}_c + e\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{r}_c})\cdot\frac{d\boldsymbol{r}_c}{dt} - \frac{d\boldsymbol{k}_c}{dt}\cdot(z|\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}_c}|z_c) + i\left(z_c\left|\frac{dz_c}{dt}\right.\right) - \mathcal{E}_{n\boldsymbol{k}_c;\boldsymbol{r}_c}. \qquad (8)$$

ただし，（摂動の微分$/k_c$）および κ/k_c の 2 次以上を無視し，時間に関する全微分項を省略した．したがって，この結果が良い評価式であるためには，摂動の空間変化は波長（$2\pi/k_c$）に比べて十分に緩やかであり，また波束の拡がりも波長に比べて十分に大きい必要がある．最後に式 (8) の変分をとることにより，目的とする運動方程式が得られる．

$$\frac{d\boldsymbol{r}_c}{dt} = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}_c}\mathcal{E}_{n\boldsymbol{k}_c;\boldsymbol{r}_c} + \frac{d\boldsymbol{k}_c}{dt}\times(z_c|\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}_c}|z_c), \qquad (9)$$

$$\frac{d\boldsymbol{k}_c}{dt} = -\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}_c}\mathcal{E}_{n\boldsymbol{k}_c;\boldsymbol{r}_c} + \frac{d\boldsymbol{r}_c}{dt}\times e\boldsymbol{B}_{\boldsymbol{r}_c}, \qquad (10)$$

$$i\frac{d|z_c)}{dt} = \frac{d\boldsymbol{k}_c}{dt}\cdot\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}_c}|z_c). \qquad (11)$$

ここで $\boldsymbol{B}_{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}\times\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{r}}$ は外部磁場，$\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}}$ は次式で定義される Berry 曲率と呼ばれる量である．

$$\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}} + i\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}}. \qquad (12)$$

式 (9) と式 (10) を対比してみると，Berry 曲率が磁場と双対的な関係になっていることが分かる．

式 (9) の第 2 項はエネルギー分散から決まる群速度と区別して，異常速度と呼ばれる[4]．異常速度は，固体中電子系における異常 Hall 効果[5]，量子 Hall 効果[6]，スピン Hall 効果[7]に対する幾何学的な解釈を与えてくれる．文献 2, 3) において，筆者らが光に対する異常速度の効果を「光の Hall 効果」と呼んだのは，上記の効果との類似性を意識したためである．後ほど紹介するが，界面における全反射の際に見られる Imbert–Fedorov 効果[8] もこの効果の一形態として理解することができる．

■ 3. 運動方程式の具体例 ■

ここでは実際に運動方程式を解くことはしないが，電子と光の類似点と相異点を見るために，「相対論的電子型の分散をもつ 2 バンド模型」と「局所的に等方な媒質中の光」に対するものを対比させながら，それぞれの波束の運動を概観してみよう．

前者において摂動がない場合のハミルトニアンを $\mathcal{H} = -iv\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{\alpha} + \Delta_g\beta$ （$\boldsymbol{\alpha}$, β: Dirac 行列）とすると，エネルギー固有値 $\pm E_{\boldsymbol{k}} = \pm\sqrt{v^2k^2+\Delta_g^2}$ が得られる．上部バンドについて考えることにして，$|u_{n\lambda\boldsymbol{k}}\rangle$ を改めて $|u_{\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$ と表すと，その解は $|u_{\boldsymbol{k}\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2E_{\boldsymbol{k}}}}(\sqrt{E_{\boldsymbol{k}}+\Delta_g}\chi_{\boldsymbol{k}\pm}, \pm\sqrt{E_{\boldsymbol{k}}-\Delta_g}\chi_{\boldsymbol{k}\pm})^T$, $\chi_{\boldsymbol{k}+} = (e^{-i\frac{\phi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}, e^{i\frac{\phi}{2}}\sin\frac{\theta}{2})^T$, $\chi_{\boldsymbol{k}-} = -i\sigma_2\chi_{\boldsymbol{k}+}^*$ となる．（$\boldsymbol{\sigma}$: Pauli 行列，(θ,ϕ): $\boldsymbol{k}$ 方向の極座標．）それぞれの状態の意味を理解するために，スピン演算子を $\boldsymbol{s} = \frac{1}{2}\mathrm{diag}(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma})$ として，波束のスピンを計算してみると $\langle W|\boldsymbol{s}|W\rangle \cong (z_c|\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}_c}|z_c)$ を得る．ただし

$$\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{2}\left[\frac{\Delta_g}{E_{\boldsymbol{k}}}(\sigma_1\boldsymbol{e}_\theta + \sigma_2\boldsymbol{e}_\phi) + \sigma_3\boldsymbol{e}_k\right], \qquad (13)$$

$[\boldsymbol{e}_\theta, \boldsymbol{e}_\phi, \boldsymbol{e}_k]$ は $\boldsymbol{k}$-空間極座標系の基底ベクトル．したがって $|z_c) = (1,0)^T$ と $(0,1)^T$ は，$\boldsymbol{k}$ 方向とその逆方向に偏極した状態を表している．先に示した $|u_{\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$ に対する Berry 接続は

$$\boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{2k}\left[\frac{\Delta_g}{E_{\boldsymbol{k}_c}}(-\sigma_2\boldsymbol{e}_\theta + \sigma_1\boldsymbol{e}_\phi) - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sigma_3\boldsymbol{e}_\phi\right] \qquad (14)$$

となり，Berry 曲率 $\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{k}} = \frac{v^2}{E_{\boldsymbol{k}}^2}\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}}$ を得る．この結果より幾何学的位相の効果と内部角運動量が密接に関係していることが理解できるであろう．

さて摂動が加わり，例えば $\mathcal{E}_{\boldsymbol{k}_c;\boldsymbol{r}_c} = E_{\boldsymbol{k}_c} + V_{\boldsymbol{r}_c}$ などとなった場合を考えてみよう．Berry 接続と Berry 曲率を運動方程式に代入すると，エネルギーの保存（$d\mathcal{E}_{\boldsymbol{k}_c;\boldsymbol{r}_c}/dt = 0$）が見てとれる．偏極率の変化は，$\frac{d}{dt}(z_c|\sigma_3|z_c) = \frac{\Delta_g}{2kE_{\boldsymbol{k}}}\frac{d\boldsymbol{k}}{dt}\cdot(z_c|[\sigma_1\boldsymbol{e}_{\theta c} + \sigma_2\boldsymbol{e}_{\phi c}]|z_c)$ となり，相対論的極限に対応する $\Delta_g = 0$ の場合は偏極率が保存することが分かる．またスピンの変化は以下のようになる．

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}(z_c|\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}_c}|z_c) \\
&= -\frac{v^2 k_c}{2E_{\boldsymbol{k}_c}^2}(z_c|\sigma_3|z_c)\left[\boldsymbol{e}_{kc} \times \left(\boldsymbol{e}_{kc} \times \frac{d\boldsymbol{k}_c}{dt}\right)\right] \\
&\quad -\frac{\Delta_g}{2E_{\boldsymbol{k}_c}^2}\frac{dE_{\boldsymbol{k}_c}}{dt}\left[(z_c|\sigma_1|z_c)\boldsymbol{e}_{\theta c} + (z_c|\sigma_2|z_c)\boldsymbol{e}_{\phi c}\right].
\end{aligned} \tag{15}$$

この模型では $|\Delta_g| \gg vk$ が非相対論的極限に相当し，確かに $|\Delta_g| \to \infty$ において $\frac{d}{dt}(z|\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}}|z) \propto 1/\Delta_g^2 \to 0$ のようにスピン軌道相互作用が小さくなっていく．固体電子論的に解釈すると，$|\Delta_g| \to \infty$ はギャップが大きくなりバンド間の相関が稀薄になることを意味するので，この効果が多バンド効果であり，上部バンドへの射影という手続きが幾何学的効果の背景にあることが分かる．

軌道角運動量とスピンをあわせて，全角運動量を

$$\boldsymbol{j}_c = \boldsymbol{r}_c \times \boldsymbol{k}_c + (z_c|\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}_c}|z_c) \tag{16}$$

と定義すれば，その変化は次式で与えられる．

$$\frac{d\boldsymbol{j}_c}{dt} = \boldsymbol{r}_c \times \frac{d\boldsymbol{k}_c}{dt}. \tag{17}$$

右辺はトルクであり，中心力 $\left(\frac{d\boldsymbol{k}_c}{dt} \propto \boldsymbol{r}_c\right)$ に対しては $\boldsymbol{j}_c$ が保存することが確かめられる．

さて今度は光の場合を見よう．次節のための準備として，内部軌道角運動量をもった波束を考えてみる．まず内部軌道角運動量がない場合の無摂動系の解は，$\{\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\}$ を任意の直交する偏光ベクトルの組として，$|u_{\boldsymbol{k}\lambda}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}, \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda})^T$ と表される．内部軌道角運動量をもった状態の構成法は一通りではないが[9,10]，l_λ を任意の整数として以下のものを考えよう．

$$u_{\boldsymbol{k}\lambda} \to e^{il_\lambda\varphi_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}_c}}u_{\boldsymbol{k}\lambda}, \tag{18}$$

$$\varphi_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}_c} = \arctan\frac{\boldsymbol{e}_{\phi_c}\cdot\boldsymbol{k}}{\boldsymbol{e}_{\theta_c}\cdot\boldsymbol{k}}. \tag{19}$$

ある適当な偏光状態 λ に対して $l_\lambda = l$, それと直交する状態 λ' に対して $l_{\lambda'} = l'$ の重ね合わせを考えると，Berry 接続と Berry 曲率は円偏光を基底とする表示において以下のように表される．

$$\boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}} = -\frac{\cos\theta}{k\sin\theta}(l_{\mathrm{OAM}} + \sigma_3)\boldsymbol{e}_\phi, \tag{20}$$

$$\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{k^2}(l_{\mathrm{OAM}} + \sigma_3)\boldsymbol{e}_k. \tag{21}$$

ここで l_{OAM} は整数固有値の組（l, l'）をもつ 2 行 2 列エルミート行列である．

摂動の効果を $\mathcal{E}_{\boldsymbol{k}_c;\boldsymbol{r}_c} = k_c/n_{\boldsymbol{r}_c}$（$n_{\boldsymbol{r}}$: 屈折率）として，上記の結果を運動方程式に代入すると次のことが見てとれる．円偏光の基底において l_{OAM} が対角形になっている場合[11]を除き，一般に $l \neq l'$ の場合，偏極率 $(z_c|\sigma_3|z_c)$ は保存しない．しかし興味深いことに，この場合も一般化した偏極率 $(z_c|[l_{\mathrm{OAM}} + \sigma_3]|z_c)$ は保存している．先ほどの電子系の例との類推から，$\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{k}}$ の表式より，

$$\boldsymbol{j}_{\mathrm{int}} = (z_c|[l_{\mathrm{OAM}} + \sigma_3]|z_c)\boldsymbol{e}_{kc} \tag{22}$$

を内部角運動量と見なして，全角運動量を

$$\boldsymbol{j}_c = \boldsymbol{r}_c \times \boldsymbol{k}_c + \boldsymbol{j}_{\mathrm{int}} \tag{23}$$

と定義すると，式 (17) が成り立つことが分かる．したがって，例えば屈折率の分布 $n_{\boldsymbol{r}}$ が z-軸に関して回転対称性をもつ場合は，j_{cz} が保存することになる．

以上で見た電子と光の例の類似点と相異点を整理してみよう．電子の例（$\Delta_g = 0$）と光の例（$l = l' = 0$）を比較してみると，スピンの大きさの比が $1:2$ になっている点は異なるが，双方ともに線形のエネルギー分散をもっている．このことを反映して Berry 曲率が 1/2 の因子を除いて一致している．つまり，摂動の入り方や統計性の違いを別にすれば，元々の波動理論の詳細によらず幾何学的な効果は同じように理解できることになる．一方，相異点として，光の例では上部バンドへの射影という手続きなしに幾何学的効果が出てきた．これは物理的状態への射影を暗黙のうちにとっていたためである．（一様等方な媒質中では横波の電磁波のみが物理的に許されることと対応している．）ただしフォトニック結晶中の光は固体中の電子と同様にバンドをつくるので，これらのバンドへの射影によっても幾何学的効果が現れる[2,3]．

4. 粒子描像の適用性と限界

運動方程式の導出の際，摂動の空間変化が波長に比べて十分に緩やかであることを仮定したが，このことは波束に対する粒子描像の限界を示唆している．例えば，摂動が波長と同程度に空間変調している場合には，回折格子と同様に働き，干渉効果が顕著になることは容易に想像できるであろう．また反射と透過が同程度であれば波束の分裂を無視できない．ここでは界面（$z=0$）における波束の反射・透過[10,12]を例にして，粒子描像の適用性と限界を見ていくことにする．ただし入射光の中心波数ベクトル $\boldsymbol{k}^I$ の大きさに比べて，$\boldsymbol{k}$-空間における波束の拡がり κ は十分小さいものとする．

以下では入射，反射，透過光に対する指標として I, R, T を用い，波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ の平面波を入射したときの反射・透過光の波数ベクトルを $\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{k}}^R$ および $\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{k}}^T$，反射・透過係数を $R_{\boldsymbol{k}\lambda}$ および $T_{\boldsymbol{k}\lambda}$ $(\lambda=p,s)$ などと表す．（表示の都合上，$\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{k}}^I=\boldsymbol{k}$，$I_{\boldsymbol{k}\lambda}=1$.）入射側の誘電率 ϵ_1 と透磁率 μ_1 を基準とした相対的な誘電率，透磁率，屈折率を $\epsilon_A, \mu_A, n_A=\sqrt{\epsilon_A}\sqrt{\mu_A}$ とする．（$A=I,R$ の場合はすべて 1 となる．）一般的な波束を扱うために，入射波束の偏光状態に $\boldsymbol{k}$ 依存性を導入して $|z_{\boldsymbol{k}}^I\rangle$ $\left(\sum_\lambda |z_{\boldsymbol{k}\lambda}^I|^2=1\right)$ を考えるが，$z_{\boldsymbol{k}\lambda}^I$ とその微分は $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}^I$ において正則であるとする．また円偏光を基底にした表示 $|z_{\boldsymbol{k}}^I\rangle=(z_{\boldsymbol{k}+}^I, z_{\boldsymbol{k}-}^I)^T$ と p 偏光・s 偏光による表示の関係は，$z_{\boldsymbol{k}p}^I=\frac{1}{\sqrt{2}}(z_{\boldsymbol{k}+}^I+z_{\boldsymbol{k}-}^I)$，$z_{\boldsymbol{k}s}^I=\frac{i}{\sqrt{2}}(z_{\boldsymbol{k}+}^I-z_{\boldsymbol{k}-}^I)$ である．簡単のために内部軌道角運動量は偏光に依存しない場合を考えると，波束の電場成分は次式で表される．（以下，$A=I,R,T$.）

$$\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{r}}=\theta(-z)(\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{r}}^I+\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{r}}^R)+\theta(z)\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{r}}^T, \tag{24}$$

$$\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{r}}^A=\frac{\sqrt{N_I}}{\sqrt{2\epsilon_1}}\int\frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\sqrt{E_{\boldsymbol{k}}}A_{\boldsymbol{k}}w_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}^I} \times e^{i\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{k}}^A\cdot\boldsymbol{r}-iE_{\boldsymbol{k}}t}\boldsymbol{U}_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}^I}^A, \tag{25}$$

$$E_{\boldsymbol{k}}=v_AK_{\boldsymbol{k}}^A=\frac{k}{\sqrt{\epsilon_1}\sqrt{\mu_1}}, \tag{26}$$

$$z_{\boldsymbol{k}\lambda}^A=\frac{A_{\boldsymbol{k}\lambda}}{A_{\boldsymbol{k}}}z_{\boldsymbol{k}\lambda}^I, \quad (\lambda=p,s), \tag{27}$$

$$\boldsymbol{U}_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}_I}^A=e^{il\varphi_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}^I}}\sum_\lambda z_{\boldsymbol{k}\lambda}^A\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}^A, \tag{28}$$

$$A_{\boldsymbol{k}}=\sqrt{|A_{\boldsymbol{k}p}z_{\boldsymbol{k}p}^I|^2+|A_{\boldsymbol{k}s}z_{\boldsymbol{k}s}^I|^2}, \tag{29}$$

$$A_{\boldsymbol{k}}^E=\frac{\sqrt{\epsilon_A}}{\sqrt{\mu_A}}\left|\frac{\cos\Theta_{\boldsymbol{k}}^A}{\cos\theta}\right||A_{\boldsymbol{k}}|^2. \tag{30}$$

ここで $\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}^{I,R,T}$ は入射，反射，透過光の偏光ベクトル．また $\Theta_{\boldsymbol{k}}^A$ と θ を $\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{k}}^A$ と $\boldsymbol{k}$ の極角として，エネルギー反射率・透過率 $A_{\boldsymbol{k}}^E$ $(A=R,T)$ も示した．方位角 ϕ は $\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{k}}^A$ に共通．

入射，反射，透過波束が十分に区別できる状況で，エネルギーを見積もってみると，κ/k^I の 1 次までの近似で $N_IA_{\boldsymbol{k}^I}^E E_{\boldsymbol{k}^I}$ となる．そこで $N_IA_{\boldsymbol{k}^I}^E$ をそれぞれの波束の光子数と見なして光子あたりの平均をとったものを $\langle\cdots\rangle_A$ $(A=I,R,T)$ と表すことにする．例えば角運動量は次式で評価される．

$$\langle\boldsymbol{j}\rangle_A\cong\frac{1}{A_{\boldsymbol{k}^I}^E}\int\frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}A_{\boldsymbol{k}}^E|w_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}^I}|^2 \times\sum_{i,j}U_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}_I,i}^{A*}[\hat{\boldsymbol{j}}]_{ij}U_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}_I,j}^A, \tag{31}$$

$$[\hat{\boldsymbol{j}}]_{ij}=i\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{k}}^A}\times\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{k}}^A\delta_{ij}+\boldsymbol{S}_{ij}. \tag{32}$$

ここで $\boldsymbol{S}$ は式 (3) で定義された行列．運動量 $\langle\boldsymbol{k}\rangle_A$ や座標 $\langle\boldsymbol{r}\rangle_A$ は，上式において $[\hat{\boldsymbol{j}}]_{ij}$ を $\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{k}}^A\delta_{ij}$ や $i\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{k}}^A}\delta_{ij}$ とすればよく，以下の結果を得る．

$$\langle\boldsymbol{k}\rangle_A=k^A\boldsymbol{s}^A, \quad \boldsymbol{s}^A=\boldsymbol{e}_k^A+\mathcal{O}(2), \tag{33}$$

$$\langle\boldsymbol{r}\rangle_A=v_At\boldsymbol{s}^A+\frac{1}{k^A}\left[\xi_d^A\boldsymbol{e}_\theta^A+(\eta_d^A+\eta_g^A)\boldsymbol{e}_\phi^A +i\left(z_{\boldsymbol{k}}^A\left|\frac{\partial z_{\boldsymbol{k}}^A}{\partial\ln k}\right.\right)_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}^I}\boldsymbol{e}_k^A\right]+\mathcal{O}(2), \tag{34}$$

$$\xi_d^A=ln_A\frac{\cos\theta_A}{\sin 2\theta_I}\left(\frac{\partial}{\partial\phi}\ln A_{\boldsymbol{k}}^E\right)_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}^I} +in_A\frac{\cos\theta_A}{\cos\theta_I}\left(z_{\boldsymbol{k}}^A\left|\frac{\partial z_{\boldsymbol{k}}^A}{\partial\theta}\right.\right)_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}^I}, \tag{35}$$

$$\eta_d^A=-\frac{ln_A}{2}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\ln A_{\boldsymbol{k}}^E\right)_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}^I} +\frac{i}{\sin\theta_A}\left(z_{\boldsymbol{k}}^A\left|\frac{\partial z_{\boldsymbol{k}}^A}{\partial\phi}\right.\right)_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}^I}, \tag{36}$$

$$\eta_g^A=\frac{l}{2}\left(n_A-\frac{1}{n_A}\right)\tan\theta_I +(z_{\boldsymbol{k}^I}^A|\sigma_3|z_{\boldsymbol{k}^I}^A)\cot\theta_A. \tag{37}$$

ここで $\boldsymbol{k}^A=\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{k}^I}^A$，$\theta_A=\Theta_{\boldsymbol{k}^I}^A$，$[\boldsymbol{e}_\theta^A, \boldsymbol{e}_\phi^A, \boldsymbol{e}_k^A]$ は $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}^A$ における $\boldsymbol{k}$-空間極座標系の基底ベクトル，$\mathcal{O}(2)$ は κ/k^A の 2 次以上の補整．また $\boldsymbol{s}^I$ には補整がなく $\boldsymbol{s}^I=\boldsymbol{e}_k^I$．$(z_{\boldsymbol{k}^I}^A|\sigma_3|z_{\boldsymbol{k}^I}^A)$ は円偏光を基底とした表現である．式 (34) より，単純に予想される軌跡から反射・透過波束の中心が波長程度ずれることが分かる．全反射の場合に $l=0$ とし $|z_{\boldsymbol{k}}^I\rangle$ を定数としたものは，ξ_d^R が Goos–Hänchen 効果，η_g^R が Imbert–Fedorov 効果として知られており[8)]，内部軌道角運動量（$l\neq 0$）に関する効果も最近の実験によって確認

されている[13,14]．また式 (33) より一般の入射波束に対しては，Snell の法則が $\mathcal{O}(2)$ で成り立たず[10]，特に入射面に垂直な方向への角度のずれが次式で与えられる．

$$e_\phi^A \cdot s^A \cong \frac{1}{2\sin\theta_A}\left(\frac{\partial}{\partial\phi}\ln A_{\boldsymbol{k}}^E\right)_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}^I}\left(\frac{\kappa}{k^A}\right)^2. \tag{38}$$

反射・透過係数 $A_{\boldsymbol{k}\lambda}$ $(\lambda = p, s)$ は極角 θ のみの関数であるので，$|z_{\boldsymbol{k}\lambda}^I|$ の方位角 ϕ 依存性がこの補整の原因である．(式 (29) および式 (30) 参照．) 同様の近似により，角運動量が次式で与えられる．

$$\langle \boldsymbol{j}\rangle_A = \langle \boldsymbol{r}\rangle_A \times \langle \boldsymbol{k}\rangle_A + \boldsymbol{j}_{\rm int}^A + \mathcal{O}(2), \tag{39}$$

$$\boldsymbol{j}_{\rm int}^A = \left[l\frac{\cos^2\theta_I + \cos^2\theta_A}{2\cos\theta_I\cos\theta_A} + (z_{\boldsymbol{k}^I}^A|\sigma_3|z_{\boldsymbol{k}^I}^A)\right]\boldsymbol{e}_k^A, \tag{40}$$

式 (39) の関係より，入射面に垂直な方向への反射・透過波束の横ずれ $\boldsymbol{e}_\phi^I\cdot(\langle \boldsymbol{r}\rangle_A - \langle \boldsymbol{r}\rangle_I)$ [式 (34) 参照] は，内部角運動量 $j_{{\rm int},z}^A$ の変化による幾何学的な効果 (η_g^A) と角運動量 $\langle j_z\rangle_A$ 自体が保存しないことによる効果 (η_d^A) からきている．そこで，$\langle j_z\rangle_A$ を具体的に見ると以下のようになっている．

$$\langle j_z\rangle_A = l\cos\theta_I + \frac{l}{2}\sin\theta_I\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\ln A_{\boldsymbol{k}}^E\right)_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}^I} - i\left(z_{\boldsymbol{k}}^A\left|\frac{\partial z_{\boldsymbol{k}}^A}{\partial\phi}\right.\right)_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}^I} + \mathcal{O}(2). \tag{41}$$

したがって，$l \neq 0$ であったり，$\Im\ln(z_{\boldsymbol{k}s}^{I*}z_{\boldsymbol{k}p}^I)$ が方位角依存性をもっている場合 (次式参照) には，$\langle j_z\rangle_A$ が必ずしも保存しないことが分かる．

$$-i\left(z_{\boldsymbol{k}}^A\left|\frac{\partial z_{\boldsymbol{k}}^A}{\partial\phi}\right.\right) + i\left(z_{\boldsymbol{k}}^I\left|\frac{\partial z_{\boldsymbol{k}}^I}{\partial\phi}\right.\right) = \frac{1}{2}\left[\frac{|A_{\boldsymbol{k}p}z_{\boldsymbol{k}p}^I|^2 - |A_{\boldsymbol{k}s}z_{\boldsymbol{k}s}^I|^2}{|A_{\boldsymbol{k}p}z_{\boldsymbol{k}p}^I|^2 + |A_{\boldsymbol{k}s}z_{\boldsymbol{k}s}^I|^2} - (|z_{\boldsymbol{k}p}^I|^2 - |z_{\boldsymbol{k}s}^I|^2)\right]\frac{\partial}{\partial\phi}\Im\ln(z_{\boldsymbol{k}s}^{I*}z_{\boldsymbol{k}p}^I). \tag{42}$$

ただし z-軸まわりの回転対称性より電磁場全体としての角運動量の z 成分は保存しなければならないが，式 (41) の近似の範囲でも $\langle j_z\rangle_I = R_{\boldsymbol{k}^I}^E\langle j_z\rangle_R + T_{\boldsymbol{k}^I}^E\langle j_z\rangle_T$ が確かめられる．

逆に言えば，界面のような極限的な状況においても，$l = 0$ であり $|z_{\boldsymbol{k}}^I)$ が定数であるような入射波束に対しては，$\langle j_z\rangle_A$ の保存 ($\langle j_z\rangle_A = \langle j_z\rangle_I$) などの粒子的な側面が現れてくる[2,3]．この条件の物理的な意味を入射波束の性質から見てみよう．式 (32) において，$\hat{j}_z$ を $\hat{j}_z^2$ としたものから，$\langle j_z\rangle_I$ の揺らぎを評価してみる．

$$\begin{aligned}&\langle j_z^2\rangle_I - \langle j_z\rangle_I^2\\ &= \frac{l^2}{\nu}\sin^2\theta_I\left(\frac{k^I}{\kappa}\right)^2 + l\sin\theta_I\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\Im\left(z_{\boldsymbol{k}}^I\left|\frac{\partial z_{\boldsymbol{k}}^I}{\partial\phi}\right.\right)\right]_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}^I}\\ &\quad + \left[|z_{\boldsymbol{k}p}^I||z_{\boldsymbol{k}s}^I|\frac{\partial}{\partial\phi}\Im\ln(z_{\boldsymbol{k}s}^{I*}z_{\boldsymbol{k}p}^I)\right]_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}^I}^2\\ &\quad + \sum_{\lambda=p,s}\left(\frac{\partial|z_{\boldsymbol{k}\lambda}^I|}{\partial\phi}\right)_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}^I}^2 + \mathcal{O}(2).\end{aligned} \tag{43}$$

第 1 項は $|\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{e}_k^I| \to 0$ のとき，$|w_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}^I}|^2 \propto |\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{e}_k^I|^\nu$ であるとして正則化した．式 (41) と式 (43) の比較より，この揺らぎが無視できるための条件は，$\langle j_z\rangle_A$ が保存するための十分条件となっている．また式 (43) の最後の項は方位角方向への Snell の法則からのずれ [式 (38)] の原因であった．つまり入射波束が系の対称性を十分に尊重しているほど，粒子的性質がはっきりと見えてくるわけである．(粒子描像ではエネルギーと運動量の界面と平行な成分の保存から Snell の法則が導出される．) また，垂直入射の場合には，$l \neq 0$ であっても $\langle j_z\rangle_A$ が保存し得ることが指摘されている[15]．

■ 5. 緩やかな摂動に対する粒子描像の回復 ■

前節の結果より，粒子描像による記述が良い近似でなくなるのは，界面における反射・透過光への分裂はもとより，平面波に対する p 偏光・s 偏光のエネルギー反射率の差と入射角依存性に起因していることが分かる．摂動が緩やかになるに従い，本当に粒子描像は回復するのであろうか．誘電率が z 方向に連続的に変化する場合を例にその様子を確認してみよう (図 1). (詳細は文献 16) 参照.)

まず反射・透過光への分裂に関して見るために，$\epsilon(z) = \frac{1}{2}\left[(\epsilon_1+\epsilon_2) + (\epsilon_2-\epsilon_1)\tanh\frac{z}{2l}\right]$ のように長さ l 程度で入射側の ϵ_1 から透過側の ϵ_2 に変化するとしよう．以下では $n_i = \sqrt{\epsilon_i\mu_0}$ $(i = 1, 2)$ とし，界面の場合と同様に $n_1 > n_2$ に対する臨界角 θ_c を $\sin\theta_c = n_2/n_1$ と定義する．($n_1 < n_2$ の場合は $\theta_c \to \pi/2$.) s 偏光に関しては 1 次元系におけるトンネル効果の問題に変換することができて次の反射係数が得られる．

$$R_s = \frac{\Gamma(2ik_{1z}l)\Gamma(-i(k_{1z}+k_{2z})l)}{\Gamma(-2ik_{1z}l)\Gamma(i(k_{1z}-k_{2z})l)}$$

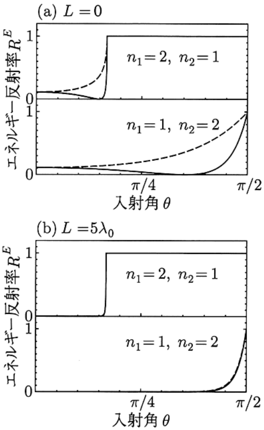


図 1　エネルギー反射率 R^E（実線：p 偏光，破線：s 偏光）．(a) 界面（$L=0$）の場合，(b) 5 波長の幅（$L=5\lambda_0$）で変化する場合．

$$\times \frac{\Gamma(1-i(k_{1z}+k_{2z})l)}{\Gamma(1+i(k_{1z}-k_{2z})l)}. \qquad (44)$$

ここで $\Gamma(w)$ はガンマ関数であり，k_{1z} と k_{2z} は $z=\mp\infty$ における入射・透過光の波数ベクトルの z 成分．入射角を θ_1 として $\theta_1>\theta_c$ の場合，k_{2z} は正符号の純虚数をとる．ガンマ関数の性質 $\Gamma^*(w)=\Gamma(w^*)$ および $\Gamma(w)\Gamma(1-w)=\pi/\sin(\pi w)$ を用いるとエネルギー反射率 $R_s^E=|R_s|^2$ は，$\theta_1>\theta_c$ の場合 $R_s^E=1$ となり，$\theta_1<\theta_c$ の場合は，$\lambda_0\ll l$（λ_0: 真空における波長）ならば，θ_c 近傍を除いて $R_s^E\sim 0$ となることが分かる．

次に p 偏光と s 偏光のエネルギー反射率の差について見てみよう．ここでは数値計算による結果を示すが，計算の都合上，変化の領域 $z\in[0,L]$ が明確な分布，$\epsilon z=\theta(-z)\epsilon_1+\theta(z-L)\epsilon_2+\theta(z)\theta(L-z)\left[\epsilon_1+(\epsilon_2-\epsilon_1)\sin^2\frac{\pi z}{2L}\right]$，を考えた．図 1(a) には比較のために界面の場合（$L=0$）を示し，図 1(b) に 5 波長の幅で誘電率が変化する場合（$L=5\lambda_0$）を示す．後者では p 偏光（実線）と s 偏光（破線）の結果がほぼ重なっており，また前述の解析（s 偏光）とも定性的に一致している．以上より，間接的にではあるが，誘電率や透磁率の変化が波長に比べて緩やかになるに従い，粒子描像が良い近似となることが理解できるであろう．

■　6. おわりに　■

本稿では光波束の動力学における幾何学的位相の効果を粒子描像に基づいた運動方程式を通じて概観し，その適用性と限界について見てきた．話を具体的にするために基本的な例を紹介したが，この問題は基礎的な興味にとどまらず，光波束を情報伝達媒体として見た場合，応用上も重要となる可能性を秘めている[15]．例えば偏光や内部軌道角運動量を利用した量子ビット（qubit）やその多重化（quNit）が提案されているが[9]，これらの情報単位はいずれも幾何学的位相と関係している．粒子描像による定性的な考察と波動理論による詳細な知見との対応を検討することは，光回路中を巡る間に光波束の情報が受ける影響についての理解を深めてくれるであろう．

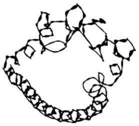
本稿は，村上修一氏，永長直人教授との共同研究[2,3]に基づいており，また，佐々田博之教授，K.Yu. Bliokh 氏，V.G. Fedoseev 教授との議論を参考にさせていただきました．この場を借りて心よりお礼申し上げます．

参考文献

1) *Geometrical Phases in Physics*, edited by A. Shapere and F. Wilczek, World Scientific (1989).
2) M. Onoda, S. Murakami, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 083901 (2004).
3) M. Onoda, S. Murakami, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. E* **74**, 066610 (2006).
4) E.N. Adamas and E.I. Blount, *J. Phys. Chem. Solids* **10**, 286 (1959).
5) R. Karplus, and J.M. Luttinger, *Phys. Rev.* **95**, 1154 (1954).
6) M. Chang and Q. Niu, *Phys. Rev. B* **53**, 7010 (1996).
7) S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, *Science* **301**, 1348 (2003).
8) 辻内順平，『光学概論 I』，朝倉書店 (2002).
9) *Optical Angular Momentum*, edited. by A. Allen, S.M. Barnett, and M.J. Padgett, Institute of Physics Publishing (2003).
10) V.G. Fedoseev, *Opt. Commun.* **193**, 9 (2001).
11) K. Yu. Bliokh, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 043901 (2006).
12) V.G. Fedoseev, *Opt. Spectrosk.* **71**, 992 (1991) [*Opt. Spectrosc.* (USSR) **71**, 570 (1991)].
13) R. Dasgupta and P.K. Gupta, *Opt. Commun.* **257**, 91 (2006).
14) H. Okuda and H. Sasada, *Opt. Express* **14**, 8393 (2006).
15) W. Nasalski, *Phys. Rev. E* **74**, 056613 (2006).
16) 光学実務資料集第 23 章第 3 節，情報機構 (2006).

（おのだ・まさる，独立行政法人産業技術総合研究所）

非可換ベリー位相



初貝　安弘

1. 量子力学と位相

日常の世界での古典的な粒子（質点）の運動はニュートンの運動方程式により十分正確に記述されていますが，小さな系，極めて外乱を受けにくい系などの極限的な状況における運動はシュレディンガー方程式と呼ばれる，より基本的な法則で支配されていて，ニュートン方程式は近似的に成立するに過ぎないことは実験的な事実です．金属中の電子は豆電球を点灯させるときには古典的な電荷の運動と考えられるわけですが，最近話題となっているナノ構造デバイス中の運動は量子力学による記述を必要とするわけです．マクロな世界での古典的運動が物理系の大きさが小さくなるにつれ量子力学による補正（量子補正）を受け，より小さなナノワールドでは補正では済まず，量子効果が本質的となります．今後の 21 世紀においては量子効果を本質的に用いた，いわゆる量子デバイスが実現するでしょう．そこで実現する高度情報化社会においては量子効果は机上の空論ではなく，本質的に現象を決定する重要な因子となることに疑いはありません．

この量子的な世界観に立てば，粒子の運動は**波動関数**と呼ばれる「複素数」で表現されることとなります．これは古典的な粒子の運動は，ある時刻の粒子の場所を指定する座標である実数で表現されることと対比的です．複素数 $z=re^{i\theta}$ はその絶対値 r と位相 θ という 2 つの実数の組で表されることを考えると「位相」こそが量子効果の本質的部分であるということができるでしょう．何らかの実験的観測を行ったときその時刻，場所に粒子が存在すると観測される確率は波動関数の絶対値の 2 乗として与えられます．その意味で絶対値は観測可能量となりますが，通常位相そのものは古典的な対応物がある物理量として観測されることはありません．しかしこれは何も波動関数の位相は観測できないことを意味するのではなく，干渉実験のような真に量子的な実験を行えば観測することができるわけです．例えば荷電粒子がソレノイドの周りを運動する際，磁場に直接触れることはないにも関わらず，粒子の軌道が囲む磁束に対応した干渉効果を予言するアハロノフ・ボーム効果の実験的検証等がこの種の実験に対応します[1,2]．また近年その有効性が確認され，実現の現実的可能性が議論されるようになった量子計算機の実現のためにはこの量子干渉効果が観測にかかることが必須の条件です．

2. 定常状態と断熱定理

ニュートン方程式が粒子の座標の時間変化を記述するように，シュレディンガー方程式は波動関数 $\Psi(t,\boldsymbol{r})$ の時刻 t における空間の各点 $\boldsymbol{r}$ での値を規定します．この波動関数をディラックの記法で $\Psi(t,\boldsymbol{r})=\langle\boldsymbol{r}|\Psi(t)\rangle$ と書いたときシュレディンガー方程式は次の形となります．

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle=H(t)|\Psi(t)\rangle. \quad (1)$$

ここで H は古典的にはエネルギーに対応するハミルトニアン演算子です．もし $H(t)$ が時間に依存しないときには波動関数の時間依存性を変数分離した形に $|\Psi(t)\rangle=e^{-i\omega t}|\psi\rangle$ と仮定すればシュレディンガー方程式は $H|\psi\rangle=E|\psi\rangle$, $(E=\hbar\omega)$ という固有値問題に帰着します．自明な時間依存性をもつこの波動関数 $|\Psi(t)\rangle$ により記述される状態は定常状態と呼ばれます．以下，束縛状態と呼ばれる空間的に局在した粒子的な状態に関して考察を進めてみます．このとき，エネルギーは $E=E_1,E_2,\cdots$ と離散的な値をとります．こ



図 1　断熱定理：断熱ポテンシャル中を急いで動かせばどこかに行ってしまう籠の鳥もゆっくり動かせば籠の中から逃げられません．

こで少し条件を緩めて物理系は時間に依存するパラメターの組 $\boldsymbol{R}(t)=(x^1(t),x^2(t),\cdots)$ により指定されハミルトニアンは明示的には時間に依存しないがパラメター $\boldsymbol{R}(t)$ を経由して $H(\boldsymbol{R}(t))$ と時間変化するとしましょう．ここでシュレディンガー方程式による時間発展とは独立に

$$H(\boldsymbol{R})|\boldsymbol{R}\rangle=E(\boldsymbol{R})|\boldsymbol{R}\rangle \tag{2}$$

という各時間（スナップショット）ごとの固有値問題を考えることができます．ここでパラメター $\boldsymbol{R}$ 依存性を明示的に示しました．また各固有状態は $\langle\boldsymbol{R}|\boldsymbol{R}\rangle=1$ と規格化されているとします．

一方，波動関数の時間発展はこの固有値問題とは一般には無関係ですが，**断熱定理**と呼ばれる重要な定理は次の事実を主張します[3)]．「スナップショットハミルトニアンの特定の束縛状態から時間発展を開始し，各固有値が孤立したままであり，なおかつパラメターの変化が十分にゆっくりしているとき，シュレディンガー方程式の解である波動関数は各時刻ごとのハミルトニアンの固有状態であり続ける[*1)]（図 1 参照）．」

つまり，この断熱過程において $|\Psi(0)\rangle=|\boldsymbol{R}_0\rangle$ と初期状態（時刻 0 とします）で固有値 $E(\boldsymbol{R}_0)$ の束縛状態にあるとすれば，

$$H(\boldsymbol{R}_t)|\Psi(t)\rangle=E(\boldsymbol{R}_t)|\Psi(t)\rangle \tag{3}$$

$(\boldsymbol{R}_0=\boldsymbol{R}(0),\boldsymbol{R}_t=\boldsymbol{R}(t))$ と時刻 t でもスナップショットハミルトニアンの固有状態となります[*2)]．

3. ベリー位相とゲージ変換

(3) 式は，断熱過程においては波動関数 $|\Psi(t)\rangle$ が一般には無関係なはずのスナップショットハミルトニアン $H(\boldsymbol{R}_t)$ の固有値 $E(\boldsymbol{R}_t)$ の固有状態であることを意味します．固有方程式は斉次の線形方程式なので解の定数倍もまた解ですから，たとえ規格化の条件 $\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle=1$ を要求してもその位相は断熱定理だけでは決定できません．しかしシュレディンガー方程式の解を次の形で探してもよいことを断熱定理は教えます．

$$|\Psi(t)\rangle=|\boldsymbol{R}_t\rangle U(t). \tag{4}$$

あらかじめ準備しておいた $|\boldsymbol{R}\rangle$ からの位相のずれが U というわけです．ここで規格化の条件から $|U|^2=1$ が必要です．これをシュレディンガー方程式に代入することでこの位相因子 $U=e^{i\Gamma}$ は次の方程式を満たすことがわかります[*3)]．

$$\dot{U}U^{-1}=-\langle\boldsymbol{R}_t|\dot{\boldsymbol{R}}_t\rangle-iE(\boldsymbol{R}_t)/\hbar. \tag{5}$$

これを Γ について解けば，$\Gamma(t)=\gamma_R(C)+\Gamma_0(t)$, $\Gamma_0(t)=-\int_0^t dt\,E(\boldsymbol{R}_t)$,

$$\gamma_R(C)=-i\int_C A_\mu\,dx^\mu, \tag{6}$$

$$A_\mu=\langle\boldsymbol{R}|\partial_\mu|\boldsymbol{R}\rangle \tag{7}$$

となります．ここで微分は $\partial_\mu=\frac{\partial}{\partial x^\mu}$ というパラメター空間内での微分を表し，系は時刻 0 から t までにパラメター空間上の経路 C を動くとします．$\Gamma_0(t)$ は定常状態の位相変化に対応するよく知られた項ですが，これ以外の経路 C に依存する位相である $\gamma_R(C)$ をその発見者にちなんでベリー位相と呼びます[4)]．

ここでいくつかの注意が必要です．まず，固有値問題 (2) は斉次の線形方程式ですから，上述のように $|\boldsymbol{R}\rangle$ 自体の位相も完全に任意であり不定です．そこで $|\boldsymbol{R}\rangle$ の代わりに，位相が $\omega=e^{i\theta}$, $(|\omega|=1)$ 異なる，次の $|\boldsymbol{R}'\rangle$ を使うこともできます[*4)]．

$$|\boldsymbol{R}\rangle=|\boldsymbol{R}\rangle'\omega=|\boldsymbol{R}\rangle'e^{i\theta}. \tag{8}$$

これを直接代入すると

$$A_\mu=A'_\mu+\omega^{-1}\partial_\mu\omega=A'_\mu+i\partial_\mu\theta \tag{9}$$

$(A'_\mu=\langle\boldsymbol{R}'|\partial_\mu|\boldsymbol{R}\rangle')$ と書けますが，これはマクスウェル方程式系でのゲージ変換と全く同型の変換です．つまり異なる位相の固有関数を用いることは A_μ に関してゲージ変換を引き起こすのです．この A_μ は電磁場のベクトルポテンシャルとは直接関係ないものですが，

*1)　特異性のないハミルトニアンに対して，注目する束縛状態と近接する状態のエネルギー間隔を δ，パラメター変化の典型的時間を T として $T\delta\gg\hbar$ が必要である．正確には文献 3) 参照．

*2)　$t=0$ を含み $E(\boldsymbol{R}_0)$ から連続に変化する固有値に対応する固有値問題を考えます．

*3)　$i\hbar\Big(|\dot{\boldsymbol{R}}_t\rangle U+|\boldsymbol{R}_t\rangle\dot{U}\Big)=E|\boldsymbol{R}_t\rangle U$.

*4)　ω もパラメターごとに変化してもよい．つまり一般に $\omega(\boldsymbol{R})$ と $\boldsymbol{R}$ の関数であるとします．

逆にベクトルポテンシャルの拡張であるゲージポテンシャルとしての新しい意義をもちます（$\boldsymbol{R}$ は電磁場のように4次元である必要はなく，いくらでも高次元のものが考えられます）．このゲージ変換 (8), (9) の下でベリー位相 γ_R は $\gamma_R = \gamma_{R'} + \Delta$ と Δ だけ変更を受けます．

$$\Delta = -i \int_C \omega^{-1} \partial_\mu \omega dx^\mu = \int_{\theta(C)} d\theta. \qquad (10)$$

このように γ_R は固有状態の位相の選び方に依存するので一般には意味を持ちませんが，経路 C がパラメター空間で閉曲線をつくる，つまりパラメターの値が元に戻るときには，**変換（行列）$\boldsymbol{\omega} = e^{i\theta}$ の一価性**の要求の下で Δ は 2π の整数倍となることに注意しましょう[4,5]．つまり閉曲線 C に対しては ベリー位相そのもの$\gamma_R(C)$ には 2π の整数倍の不定性がありますが，位相因子として $e^{i\gamma_R}$ は確定し，実験による量子的な観測量となり得ます．さらに，この固有関数の不定性はここでの議論において極めて本質的であることに注意しましょう．例えば (7) 式などで微分の概念が出てきますが，定義に立ち返れば

$$\partial_\mu |\boldsymbol{R}\rangle = \lim_{h \to 0} \frac{|\boldsymbol{R}(x + h\hat{x}_\mu)\rangle - |\boldsymbol{R}(x)\rangle}{h} \qquad (11)$$

と考えるわけですが，勝手な2点での位相は全く不定なのでこの極限は単純には存在せず微分すら定義されていないわけです．微分の定義のためには，経路上でなめらかな固有関数 $|\boldsymbol{R}\rangle$ を構成しておかなければなりません．上で述べたように固有関数の位相を変えることがゲージ変換をもたらしますから，これはなめらかなゲージを一つ固定することに対応します．つまり，なめらかなゲージ固定ごとにベリー位相 γ_R は確定し，ゲージに依存してベリー位相は 2π の整数倍の不定性をもつこととなります．この不定性は離散的ですので，連続変形できるゲージ変換で移り合うことはなく，この不定性をもたらすゲージ変換は「大きなゲージ変換」と呼ばれます．具体例に対して数値的にこの微分を計算することを考えれば，ここでのゲージ固定の重要性は明らかでしょう[5]．ゲージ固定により A_μ を確定したことはパラメター空間上異なる2点間の相互関係である一つの「接続」が与えられていると考えられますのでこの A_μ はベリー接続と呼ばれることもあります[6]．

基準（ゲージ）の取り方は全く任意ですが，この基準に特異性があればその分だけ観測に不定性が生じるわけです．この状況を異なる例ですが，類似のわかりやすい例を取り上げて説明してみましょう．地球上図2のように閉曲線上で風向きを測定することから閉曲線



図2　風向きの観測データを集めた予報官はこの経路の中に低気圧が1つあると判断できるのでしょうか？

内に低気圧があるかどうかを決定することを考えてみましょう．この例では中に1つの風の吸い込みとしての低気圧があることはほぼ自明のように思われますが，この思考過程においては，暗黙のうちにだれもが隣り合った地点での風向きを比較していることに注意しましょう．比較するためには隣接2点間の風向きを示す矢印を重ねるわけですが，よく考えると重ねるための平行移動の過程に任意性があることに気がつきます*5)．このようなアプリオリな平行移動の概念なしに低気圧の存在を確定するには例えば方位磁石を基準にすればよいことに気がつきます．つまり大局的に与えられた基準である方位磁石（ゲージ固定）と比較することで船の上で風向きのデータを集めるわけです．例えば，北極から十分離れた日本近海で観測した場合には，図3のようになります．このとき，方位磁石を基準とした閉曲線上での風向きデータだけから（大局的考察なしに）この閉曲線の中に低気圧が1つは最低限存在すると判断することができるでしょう．次に図4のように観測地点が北極近辺で閉曲線が北極を囲んでいる場合を考えてみましょう．このときの方位磁石による風向きの観測データは，常にほぼ北風が吹いていることを示しますから，そのデータのみを使えば，低気圧の存在には気がつかないかもしれません．

このように，大域的な基準であるゲージ固定の方法によって，風向きが定義する回転数は 2π の整数倍だけ異なることになるわけです．ベリー位相の 2π の不定性はこのアナロジーにより理解することができます[4,5]．

固有ベクトル $|\boldsymbol{R}\rangle$ は位相の自由度，つまりゲージの自由度の分不定ですが，固有空間への射影演算子 $P = |\boldsymbol{R}\rangle\langle\boldsymbol{R}|$ はゲージ不変量となりますのでこれとパラメター空間内の経路上で一意的な状態 $|\phi\rangle$（例えば

*5)　実際の観測は決して連続した点すべてで行うことはできず，離散的な点でしか行えませんが，その離散的な点を用いても同様な考察ができることが格子ゲージ理論との関連から議論されています[5,7]．

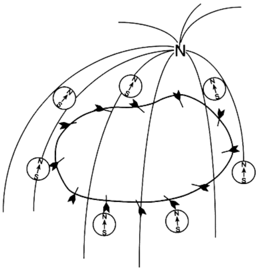


図3 方位磁石を頼りに風向きを測定したデータを聞いた日本の予報官は自信を持って低気圧がこの経路内に１つあると判断するでしょう．

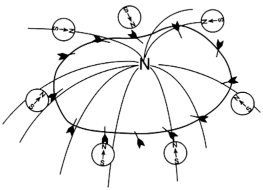


図4 北極近くで同じ観測をやったらどうでしょう？このとき，どこで観測したのかを知らない日本の（新米の）予報官は低気圧がこの経路内にあることに気がつかないかもしれません．

固定された状態）を用いて

$$|\boldsymbol{R}\rangle_\phi = P|\phi\rangle N_\phi^{-1/2}, \quad N_\phi = |\langle \boldsymbol{R}|\phi\rangle|^2 \qquad (12)$$

を用いれば，$N_\phi \neq 0$ の条件下でゲージ固定されたベリー接続が定義できることとなります[5]．この $N_\phi = 0$ を与える点が低気圧の例での「北極」に対応し，特定の $|\phi\rangle$ によるゲージが特異的になる点を与えます．実は，この特定のゲージが特異になる点はチャーン数と呼ばれる有名な位相不変量を特徴づけることともなります[4,5,8,9]．

4. 幾何学的位相としてのベリー位相

ベリーは断熱過程を考察することにより，パラメター空間内の経路のみに依存するいわば幾何学的な起源を持つ位相を発見しました[4]．しかし歴史を振り返れば，同様な起源を持つ位相は他にもあり，量子世界においては極めて基本的な意義があることが近年認識されるようになりました[*6]．これらは総称して**幾何学的位相**と呼ばれ，広くベリー位相として総称されることもあります．例えば，「アハロノフ・ボーム効果」はベリー位相としての幾何学的位相の典型例と見なすことができます．歴史を少しふり返ればディラックの磁気単極子の発見[12]，ならびにウーとヤンによる磁気単極子のゲージ理論としての幾何学的意義ならびに数学的構造（ファイバーバンドル）の記述[13]がベリー位相の発見以前から知られていました．さらには一般のゲージ場ならびに接続の理論は，幾何学的観点から数学のみならず物理としてもベリーの発見時に既に一般的に整理された状況にありました[14]．ただしベリー位相の発見により，このゲージ構造は量子論の至る所に極めて普遍的に存在することが広く認識されるようになったのだとは言えるでしょう．また，ベリー位相の発見と同時期に量子ホール効果におけるホール伝導度の極めて高い量子化は，ホール伝導度の幾何学的意義にあることが発見されました[8,15]．ベリー位相の定義の際，仮想的なベクトルポテンシャルである A_μ が定義されたのですから，現実の電磁場の例を考えれば対応する磁場 $\boldsymbol{B} = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}$ を考えることは自然でしょう．この磁場から定義されるパラメター空間全体での全磁束が前述のチャーン数と呼ばれる整数の位相不変量となり，この整数値が量子化されたホール伝導度を与えるのです．トポロジカルな不変量がホール伝導度を与えるという，この発見はベリー位相の発見とともにその後の幾何学的位相およびトポロジカルな物理量が物性論において重要な役割を果たす種々の現象の鋳型として位置づけることができます．例えば，異方的超伝導体およびスピン軌道相互作用が重要な半導体におけるスピンホール伝導度の議論は，その典型的な応用例と理解できます[16~18]．

5. 非可換ベリー位相

物理学においてはある理論が特定の現象を記述するとしても普通は必ずその適用限界があり，その限界を乗り越えるために理論の拡張が要求されます．そこでの理論的整合性を最も簡単に保つ方法は一成分の物理量を多成分とすることで，物理的には内部自由度を導入することに対応します．ディラックによるスピン自由度の導入，通常の電磁場の拡張としての非可換ゲージ場の導入がその典型的な例です．

---

*6）より広く光学および古典論においても類似の概念が重要な役割を果たす現象もあることがベリー位相の発見以降，再認識されるようになりました[10,11]．

本解説でも，今まで $U(1)$ と呼ばれる位相の自由度に関するゲージ構造がベリー接続として束縛状態の断熱的時間発展に現れることを見てきましたが，断熱過程を少し拡張した状況で考えるとより一般に非可換ゲージ場としての構造がとてもわかりやすい形で現れることがベリーの発見の直後に議論されました[19]．今まではスナップショットハミルトニアンの束縛状態には縮退がないことを仮定してきましたが，この状態が M 重に縮退することを許してみましょう．このとき，断熱定理はパラメターの変化が十分ゆっくりであれば，この縮退した固有空間内から出発した状態は，シュレディンガー方程式による時間発展によっても，この固有空間から外に出ることはないことを主張します．これによってパラメター空間内での閉曲線上を系が動くとき，系の状態は位相変化を受けるだけでなく M 個の縮退した状態の適当な線形結合の状態に変化することが許されるわけです．つまり縮退のないときは位相変化を受けるだけでしたが，多成分の場合は固有状態の組はユニタリ変換の作用を受けることとなります．譬えれば，図 5 のように断熱的にゆっくり鳥籠を動かすときには逃げられない鳥も，お互いの場所を入れ替えることはできるというところでしょう．このとき，M 個の状態をまとめて

$$|\boldsymbol{R}\rangle = (|\boldsymbol{R}_1\rangle, \cdots, |\boldsymbol{R}_M\rangle)$$

と書いて，(4) 式の $|\Psi\rangle$ としても縮退した固有状態を一緒にまとめて考えるのが便利です．つまり波動関数として多成分のものを考えることになります．この縮退した空間を内部自由度と見なすわけです．対応して (5) 式での時間発展を記述する $U(t)$ がユニタリ行列となります．行列は一般に非可換ですから逐次近似で積分する必要がありますが，経路順序積 P を使って $\boldsymbol{U}$ は次のように書き下せます*7)．



図 5　断熱ポテンシャル中をゆっくり動かせば 3 羽の鳥は逃げられないわけですが，籠の中を動いて入れ替わることは許されるでしょう．

*7)　0 から t までの時間を順に $t_1, \cdots, t_N$ と N 等分して

$$Pe^{-i\int_C A_\mu dx^\mu} = Te^{-i\int_0^t A_\mu \dot{x}^\mu\, dt} = \lim_{N\to\infty} e^{-i\Delta t \dot{x}_\mu A_\mu(x(t_N))} \cdots e^{-i\Delta t \dot{x}_\mu A_\mu(x(t_1))}.$$

$$\boldsymbol{U} = e^{i\Gamma_0} P \exp\left(-i\int_C \boldsymbol{A}_\mu\, dx^\mu\right),$$
$$\boldsymbol{A}_\mu = \langle \boldsymbol{R}|\partial_\mu|\boldsymbol{R}\rangle$$
$$= \begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{R}_1|\partial_\mu|\boldsymbol{R}_1\rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{R}_1|\partial_\mu|\boldsymbol{R}_M\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \boldsymbol{R}_M|\partial_\mu|\boldsymbol{R}_1\rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{R}_M|\partial_\mu|\boldsymbol{R}_M\rangle \end{pmatrix}. \quad (13)$$

ここで縮退のないときと同様にスナップショットの固有状態の選び方は任意であることに注意しましょう．この任意性は縮退した状態間のユニタリ変換に対応しますから変換 (8) の $\boldsymbol{\omega}$ がユニタリ行列（$\boldsymbol{\omega}^\dagger = \boldsymbol{\omega}^{-1}$）に拡張されることとなります．よって $\boldsymbol{A}_\mu$ の変換は*8)

$$\boldsymbol{A}_\mu = \boldsymbol{\omega}^{-1}\boldsymbol{A}'_\mu\boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\omega}^{-1}\partial_\mu\boldsymbol{\omega} \quad (14)$$

とゲージ理論でよく知られたものとなりこの $\boldsymbol{A}_\mu$ が非可換のゲージポテンシャルを定義することになります．特にその $U(1)$ 部分と呼ばれる $\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{A}_\mu$ については $i\theta = \det\boldsymbol{\omega}$ として $\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{A}_\mu = \mathrm{Tr}\,\boldsymbol{A}'_\mu + i\partial_\mu\theta$ と変換 (9) と同じ変換性を持ち，縮退のない場合とほぼ同様の意義をもちます[5]．この $U(1)$ 部分だけを議論する立場からは，完全な縮退は必ずしも必要でなく M 個の状態をまとめて考えることのみが本質となります．鳥籠は適当に広くてもよいというわけです．断熱性の仮定はこの場合，M 個の状態が他の状態からエネルギー的に分離されていることだけを要求し M 個の状態間の相対的なエネルギーの縮退，分離は無関係となります．

近年の研究でこの非可換ベリー接続は単に断熱過程における時間発展現象のみならず，様々な物理現象，物理系に対して幾何学的位相の観点から普遍的な新しい概念と解釈を与えることがわかってきました．その応用の範囲は極めて広いのですが，いくつか例を挙げれば，平行スピン対を許す非ユニタリ状態等の一般的な異方的超伝導相の分類[20]，グラフェンと呼ばれる炭素 2 次元単層系でのディラック電子の量子ホール効果[21]，（分数）量子ホール状態，スピン液体状態等，量子液体相における新しい秩序であるトポロジカル秩序，量子秩序等の議論[5,22]等において，この（非可換）ベリー接続は興味深い役割を果たすこととなります．

最後に非可換ベリー接続の適用例を一つだけ少し詳しく説明しましょう．ハニカム格子をつくるベンゼン環を 2 次元平面に無限に敷きつめた系はグラフェンと呼ばれ，近年実験的に構成されたため多くの興味を集めています．この系のフェルミエネルギー近傍の電子

*8)　$\partial_\mu|\boldsymbol{R}\rangle = (\partial_\mu|\boldsymbol{R}\rangle')\boldsymbol{\omega} + |\boldsymbol{R}\rangle'\partial_\mu\boldsymbol{\omega}$.

構造はエネルギー分散が運動量変化に対して線形のものとなり，通常の固体中で極めて有効な有効質量近似がそのままでは適用できずそのためゼロギャップ半導体と呼ばれる特異な系となります．これはその低エネルギーの有効理論が，自由電子もしくはホールにより記述されず，ある種の相対論的なディラック電子となることを意味します．この系に磁場をかけると通常の固体中の電子ホールとよく似たランダウ縮退が生じますが，通常と異なりランダウ準位のエネルギー間隔は等間隔とはなりません．さらにその量子ホール効果を考えるとホール伝導度に特異な量子化則が生じ（図 6），また特異なエッジ状態が重要な役割を果たします．この系における量子ホール効果の研究の際に非可換ベリー位相，ならびにベリー接続が有効に使われました[21]．グラフェンではそのハニカム格子に起因する格子の効果が本質的であり，実験で観測されるような弱磁場極限であっても，そのエネルギー準位に極めて小さなエネルギーギャップが多数存在します．そのため，個々の一電子状態ごとのホール伝導度を求めることには困難となりますが，フェルミ球全体としての多電子系のベリー接続を扱うことによりディラック電子のランダウ準位構造から理論的取り扱いが極めて容易になります．技術的にはフェルミエネルギー以下のすべての一電子軌道からなる非可換ベリー接続を構成し，その $U(1)$ 部分が多電子系のホール伝導度を与えることとなります．

以上，非可換ベリー位相の解説を目標にその基礎から最近の研究例までご紹介してきましたが，「パラメターを含む量子系における固有値問題」という極めて一般的で量子物理学の至る所に現れる基本的な設定の中にゲージ構造がとてもわかりやすい形で存在することを理解していただければ幸いです．今後ベリー位相等，幾何学的位相の現代物理学における重要な意義はより広範囲の現象の中で明らかとなっていくことは間違いないと思われます．

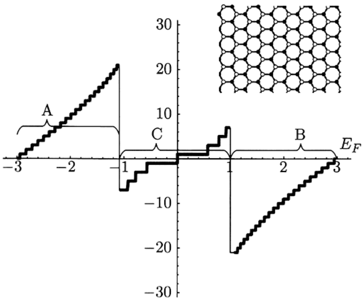


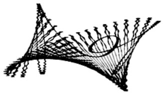
図 6　グラフェンにおける量子化されたホール伝導度を e^2/h を単位としてフェルミエネルギー E_F の関数として示したもの．A の領域は電子，B の領域はホールによる通常の量子化ホール伝導度を示し，C のゼロエネルギー近傍ではホール伝導度の量子化則は特異なディラック電子型となります[21]．

参考文献

1) Y. Aharonov and D. Bohm. *Phys. Rev.* **115**, p.485, (1959).
2) A. Tonomura and *et al. Phys. Rev. Lett.* **48**, p.1443, (1982).
3) A. Messiah. *Quantum Mechanics*. Dover, (1999).
4) M.V. Berry. *Proc. R. Soc.*, **A392**, p.45, (1984).
5) Y. Hatsugai. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **73**, p.2604, (2004); **74**, p.1374, (2005); **75**, p.123601, (2006).
6) 例えば Y.-S. Wu and H.-Z. Li. *Phys. Rev. B***38**, p.11907, (1988).
7) T. Fukui, Y. Hatsugai, and H. Suzuki. *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, p.1674, (2005).
8) D.J. Thouless, M. Kohmoto, P. Nightingale, and M. den Nijs. *Phys. Rev. Lett.* **49**, p.405, (1982).
9) M. Kohmoto. *Ann. Phys. (N.Y.)* **160**, p.343, (1985).
10) S. Pancharatnam. *Proc. Ind. Acad. Sci. A***44**, p.247, (1956).
11) J.H. Hannay. *J. Phys. A: Math. Gen.* **18**, p.221, (1984).
12) P.A.M. Dirac. *Proc. R. Soc.*, **A133**, p.60, (1931).
13) T.T. Wu and C.N. Yang. *Phys. Rev. D* **12**, p.3845, (1975).
14) T. Eguchi, P.B. Gilkey, and A.J. Hanson. *Phys. Rep.* **66**, p.213, (1980).
15) トポロジカルな観点からのレビューとして例えば Y. Hatsugai. *J. Phys. C, Condens. Matter* **9**, p.2507, (1997).
16) Y. Morita and Y. Hatsugai. *Phys. Rev. B***62**, p.99, (2000).
17) S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang. *Science* **5**, p.1348, (2003).
18) J. Sinova and *et al. Phys. Rev. Lett.* **92**, p.126603, (2004).
19) F. Wilczek and A. Zee. *Phys. Rev. Lett.* **52**, p.2111, (1984).
20) Y. Hatsugai, S. Ryu, and M. Kohmoto. *Phys. Rev. B***70**, p.054502, (2004).
21) Y. Hatsugai, T. Fukui, and H. Aoki. *Phys. Rev. B***74**, p.205414, (2006).
22) X.G. Wen. *Phys. Rev. B***40**, p.7387, (1989).

（はつがい・やすひろ，筑波大学大学院数理物質科学研究科）

位相，経路積分およびホロノミー



倉辻 比呂志

1. 序

位相（phase）の概念は，近代物理において要の概念の一つである．それは，波動（振動も含む）を特徴づける基本的な量であると言える．一言で言ってしまえば

$$U=\{\exp[i\phi]\}$$

という量で集約される．ここで，ϕ という量が，文字通り物理の意味における phase である．指数関数の肩に乗せたものは，phase factor（位相因子）と呼ばれる．この位相および位相因子をもとに，それに演算を施すという形で展開する理論が経路積分の考えである．位相が物理現象において，直接間接に効果をもたらす分野としては，やはり量子力学（物理）であるので，以下は主として量子現象を念頭に置いて述べる．

さて，もう一つの位相（topology）は純粋に数学概念である．元々は軌道の振舞いの大局的な様子を定式化するためにポアンカレによって創始されたものであるが，ある数学的対象を全体としてとらえるということが思想の柱となっている．『全体としてとらえる』という立場は近代科学をつらぬく指導原理となるものと言えよう．

そこで，いささか短絡的であるが，phase と topology を物理において直接的に結びつけることを考えてみると，それが実現される一つのやり方が経路積分と考えられる．実際，Witten の位相場の理論では経路積分が主要な道具として使われている[1)]．

ところで，topology という言葉を持ち出したが，これが経路積分とからんで現れる場合は，微分幾何学的な概念であるホロノミー（holonomy）という形で現れる場合が多い．ホロノミーを図示すれば，（少々使い古されている感があるが），図 1 のようになる．

つまり，球面の上に置かれたベクトルの『平行移動』を測地線（大円の弧）からできた閉経路に沿って元の出発点（ここでは北極）に戻ったときに，ベクトルの方向が最初のものからぶれている．このブレがホロノミーを表している．

ホロノミーの概念は，このように，閉曲線（ループ）に沿ってある量が変化するという観点が基礎になっている．別に格段のことはない概念のようではあるが，このような見方が注目されてきたのは物理の歴史の中でもそう古いことではない．生硬な言い方であるが，ある関数量がそれが定義されて空間の情報を全体として取り込んでいることを表現する量とでも言うべきか．局所的な量では

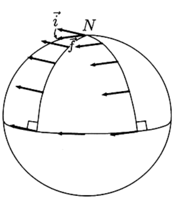


図 1　ベクトルの平行移動．

把握できないものを全体として束ねることによって見えてくる量（それは別の表現をすれば，位相不変量という量で特徴づけられる）でもって対象を眺めるという発想である[2)]．

ちなみに，ホロノミーと類似の概念としてモノドロミーの概念がある[3)]．複素関数で書かれた2階微分方程式の基本解 $f(z)$（2つの1次独立な解からなる 2×1 行列）を，確定特異点の周りに，閉曲線 C に沿って解析接続して元の点に戻ったとき，$f(Cz) = G(C)f(z)$ のように，C の挙動を反映する行列 G が，変換行列として掛かってくる．これがモノドロミー群として知られているものである．さらに，敷衍すれば，代数方程式の根の間の変換（つまり置換）を記述するのがガロア群になる．

以下，量子力学において出てくると思われるホロノミー的現象を経路積分を通じて位相という形で表現できる一つの試みについて述べてみたい．計算の詳細に渡るところは不備なところがあるかもしれないことについては，寛恕をお願いしたい．

2. 経路積分異聞

経路積分を説明する普通のやり方は，ポテンシャル問題を取り上げるのであるが，ここでは，このような通常のやり方と異なる道をとる．

出発点は，シュレーディンガー方程式でハミルトニアンが時間を『陽に』含む場合である．

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}(t)|\psi\rangle. \tag{1}$$

これを初期値問題として，解を求めると

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{T}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^T \hat{H}(t)dt\right]|\psi(0)\rangle. \tag{2}$$

ここで，T は，いわゆる経時積（time-ordered product）を表す：$\mathrm{T}\exp[-\frac{i}{\hbar}\int\hat{H}(t)dt]|\psi(0)\rangle \equiv \prod_{k=1}^{\infty}\exp[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_k)\epsilon]$; すなわち，時間間隔を等分し；$T = N\epsilon$ $(N\to\infty)$ 時間に順序をつけて，古い順に積をとることを意味する．これは，各時刻 t_k におけるハミルトニアンは，一般には互いに交換しないので時間の順序を無視するわけにいかないで，あらかじめ決めておく必要があるからである．ここで，ハミルトニアンが時間に依存するということは，注意を要する．なぜならば，通常は $\hat{H}$ に時間が含まれない場合においても状態自体は時間変化をするわけで，その場合は，ハミルトニアンが与えられると初期条件に従って時間発展する．ところが，ハミルトニアンが時刻ごとに変化すると，それに合わせて，状態変化を各時刻で調整をする必要がある．その機構を精密に追うことは非常に複雑困難な問題であろう．そこで，ある手続きを用いて，この複雑なところから，情報を引き出すことが必要になる．

ここでは，その例の一つとして一般化されたコヒーレント状態（generalized coherent state）というものを用いた経路積分を上の経時積で書かれた発展演算子で処理することを考える[4,5)]．少々杜撰ではあるが，一般的ではある．

天下り的であるが，連続パラメータ ξ でパラメトライズされた非直交状態 $|\xi\rangle$ で，かつ完全性関係

$$\int|\xi\rangle\langle\xi|d\mu(\xi) = 1 \tag{3}$$

を満たす状態のセットを考えよう．ここで，ξ は一般に複素パラメータで，$d\mu(\xi)$ は，このパラメータ空間の適当な測度（体積要素）を表す．このような状態は，overcomplete set を形成していると言われる．初期状態 $|\xi_0\rangle$ から，終状態 $|\xi_T\rangle$ への遷移振幅を考えよう．完全性関係を，時間分点 t_k に挿入することにより，

$$K(\xi'_T|\xi_0) = \int\cdots\int\prod_{k=1}^{\infty}d\mu(\xi_k)\langle\xi_{k+1}|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_k)\epsilon}|\xi_k\rangle$$

となる．ここで，$\epsilon\to 0$ のときに重なり積分に対する近似：

$$\langle\xi_{k+1}|\xi_k\rangle\sim 1+\langle\xi_k|\frac{\Delta|\xi_k\rangle}{\epsilon}\epsilon\sim\exp\left[\left\langle\xi\middle|\frac{\partial}{\partial t}\middle|\xi\right\rangle\right]\epsilon$$

を用いると，パラメータ空間における経路積分

$$K(\xi'_T|\xi_0) = \int\exp\left[\frac{i}{\hbar}W\right]D[\mu(\xi(t))] \tag{4}$$

が得られる[6,7]．ここで $D[\mu(\xi(t))]$ は，汎関数積分の測度を表す．汎関数 W は

$$W=\int_0^T \left\langle \xi \middle| i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}(t) \middle| \xi \right\rangle dt \qquad (5)$$

で与えられ，量子力学的作用関数と呼ぶべきものである．ここで，(5) 式の汎関数積分に対して，$\hbar\to 0$ の極限を考えると，$\delta W=0$ に帰結するが，これはディラックの量子変分原理として知られているものである．それはパラメータ空間の中での経路を決める．その条件の下で，無限次元積分はこの経路に対する値

$$K\sim \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^T \left\langle \xi \middle| i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}(t) \middle| \xi \right\rangle dt\right] \qquad (6)$$

に帰着する．この積分の第 1 項がいわゆる幾何学的位相を与える．これを

$$\Gamma=\int_0^T \left\langle \xi \middle| i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \middle| \xi \right\rangle dt \qquad (7)$$

と引用する．特に，$|\xi\rangle$ のパラメータ空間で，ループ C に沿った位相変化 $\Gamma(C)$ が，量子論的ホロノミーを与えることになる．$|\xi\rangle$ に断熱定理を適用した場合には $\Gamma(C)$ は Berry 位相に帰着する[6,8]．Berry 位相は，広範な分野で興味の対象となってきた（いる）ものである[9]．

3. ガウスビーム波動関数と Gouy 位相

ここで，量子力学から少しずれるが，光学から派生する問題を取り上げる．これは，次の節で扱う準古典理論に対する布石の意味合いがある．

問題は，光線の振舞いの話であって，実は非常に日常的なレンズの基礎理論と関係したものである．詳細は専門書にゆずるが[10]，ある軸に沿って光の束が伝搬するという問題を考える．軸方向の変数を s とすると，いわゆる para-axial 近似というもので，光の場 ψ に対する方程式は

$$i\lambda\frac{\partial\psi}{\partial s}=\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi \qquad (8)$$

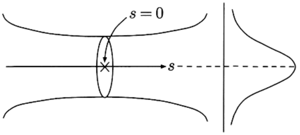


図 2　ガウスビーム．

で与えられる．簡単のため屈折率は省略した．s を時間変数に置き換えればシュレーディンガー方程式そのものにほかならない．para-axial 近似というのは近軸近似とも呼ばれる．これは，s-軸という特定の軸に沿って光が集中して伝搬することからくるものである．このような状況では，(x,y) を s 方向に垂直な平面の座標とすると，その平面では波束状に分布をしている場合を考えるのが自然である（図 2 参照）．実際，そのようなものが構成できて，ガウスビームと呼ばれている．それは次のように書かれる[10]：

$$\psi_g(\rho)=N\exp[-(a+ib)\rho^2]. \qquad (9)$$

ここで $\rho=\sqrt{x^2+y^2}$，つまり，中心軸からの距離を表す．パラメータ $\alpha\equiv a+ib$ は，s の関数である，つまり，ガウス波束の広がりが波の伝搬とともに変化していくことを示している．具体的な形は，次で与えられる．

$$a(s)=\frac{1}{w^2(s)}=\frac{1}{w_0^2}\frac{1}{1+s^2/R_0^2},\qquad b(s)=\frac{k}{2R(s)}=\frac{ks}{s^2+R_0^2}. \qquad (10)$$

ただし，$R_0=kw_0^2/2$ は光学的パラメータである．この形は直感的な意味をもっている．$w(s)$ なる量は，光線の切り口の太さを表している．（それは，ψ に，$w(s)$ の規格化定数がかかることからわかる）．これから $s=0$ のところで，光線束が最小の太さ（ウエスト (waist) = くびれ）になることがわかる．また，$R(s)$ は，波面の曲率半径を s の関数として与えたものである．

このガウスビーム波動関数に，余分の幾何学的位相が付加されることがわかっている．これは

$$\Phi_G=\tan^{-1}\left(\frac{s}{R_0}\right) \qquad (11)$$

によって与えられる．これは，19世紀の末にGouyによって見出されたのでGouy位相と呼ばれている[11]．多くのlost geometric phaseのうちで，最も古いものに属するものであろう．

Gouy位相を，(7)式で導入した幾何学的位相Γを用いて導いてみよう．状態ξとして，(11)式で与えたガウスビーム波動関数を採用すればよい．

$$\Gamma_g = \int\int \left\langle \Phi_G \middle| i\frac{\partial}{\partial s} \middle| \Phi_G \right\rangle dxdy. \qquad (12)$$

(12)式は，ガウス積分の公式を用いることにより，次のように計算される：

$$\Gamma_g = \int_{s_1}^{s_2} \frac{1}{4a}\frac{db}{ds}ds. \qquad (13)$$

ここで，$a > 0$なることに注意する．これはガウス積分の収束条件にほかならない．$a(s), b(s)$の具体的形を代入すれば，少々面倒であるが，直接的な計算により，$\Gamma_g = \Phi_G(s_2) - \Phi_G(s_1)$となる．ただし，$s$-軸上，$s_1$と$s_2$の間でのGouy位相の差を与えている[12]．

Gouy位相の意味を与えよう．光線が，$s = -\infty$から$s = +\infty$に移動するとき，ウエストの位置（$s = 0$）を通過するときに，位相がπだけ変化することを示している．この変化を，ホロノミーと解釈するために，『ループに沿った変化』という形に書き換えたほうがよい．それは次のように示せる．$s = R_0 \tan\frac{\alpha}{2}$なる変換をする（これは立体射影にほかならない）．すると，直線；$(-\infty, +\infty)$は，αを中心角とする円に射影させる．そこで，$s = -\infty$から$+\infty$へ移行するとき，ちょうど円を一周する，つまり，角度αの空間でのループに沿った変化を与えることになる．光線束のくびれの位置は，ちょうど焦点に相当した場所である．つまり，焦点を通過するときに位相が，$\pi/2$だけ飛ぶことに対応しているかのように見える．ただし，波動光学での焦点は，光の強度が発散する（無限大になる）ところであり，その点を通過するときに不連続的に位相が飛ぶのである[13]．したがって，この類似はそのまま適用することはできない．ここで言う位相の変化は光の強さは焦点（$s = 0$）において有限にどとまることに注意しよう．つまり，波動光学の幾何光学近似というのは，焦点で発散するということから明らかに近似が悪く，ガウスビーム近似というのはある意味で発散を回避しているという意味では物理的によい近似を与えているかもしれない．

4. 準古典量子化とホロノミー

シュレーディンガー方程式の準古典近似解を構成する問題は，Pauli, Van Vleckにさかのぼる長い歴史がある．ここでは，経路積分による準古典量子化に現れるホロノミー的様相を前節のGouy位相の観点から眺める試みを述べる[16]．

N次元のポテンシャル問題を例にとろう．座標は，$q = (q_1, \cdots, q_N)$で表す．ラグランジアンは，最も簡単なものをとろう．

$$L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - V(q_1, \cdots, q_N).$$

ただし，実際の問題としては，3次元を想定すればよい．空間の点，q, q'の間を結ぶ伝搬関数；$K(q'_t|q_0)$をファインマン型経路積分で表し，準古典伝搬関数は

$$K_{sc} \sim \exp\left[\frac{i}{\hbar}S_{cl}\right]K^{(2)} \qquad (14)$$

と書かれる．これは『プランク定数が微小であるべし』という号令の下，古典軌道の部分とその周りでのゆらぎの部分に分離されることを示している．ここで，$K^{(2)}$は古典軌道の周りの『量子的ゆらぎ』を表すもので，

$$K^{(2)} = \int \exp\left[\frac{i}{\hbar}S^2\{Y\}\right]D[Y(t)] \qquad (15)$$

で与えられ，これは無限次元のガウス積分である．ここで，S^2は，第2変分と言われるもので，古典軌道の周りでの作用関数をゆらぎの2次まで展開したものである：

$$S^2 = \int {}^tY\left(-\frac{d^2}{dt^2} + \left[\frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j}\right]_{cl}\right)Y dt.$$

ここで，Yは，古典軌道からのズレを表すN次元

ベクトル $Y = q - q_{cl}$．$[....]_{cl}$ は，古典軌道の上での値をとることを示している．(14) 式の準古典伝搬関数で記述される (場の理論を含む) 華麗な理論が Gutzwiller と Dashen, Hasslacher, Neveu によって建設された[14,15]．ここでは，この既知の理論に対して異なる観点からの分析を試みよう[8]．

そのために，K_{sc} の形は，N 自由度系の，いわば，自由度の分離を表していることに注目する．すなわち，S_{cl} は "軌道方向" の自由度を与え，この軌道方向をガウスビームの中心軸に対応させよう．S_2 で記述される部分は，ちょうど調和振動子の形をしている．ただし，バネ定数に相当する 2 階微分は軌道の上での値であるから，軌道を通じて時間の関数になっていること，および，各自由度は互いに結合しているので少々面倒である．そこで，ゆらぎの調和振動子を 2 つの自由度に分解しよう．すなわち，$Y(t)$ を，中心軸方向とそれに垂直な方向に分ける：$Y = (Y_{\rm T}, Y_{\rm L})$．それらを，それぞれ，縦自由度（L)，横自由度（T）と呼ぼう．そして，これらの自由度 (次元) を，それぞれ，m, n とする．縦自由度（軌道方向）が 1 次元ではないのは，これがゆらぎのゼロモードに対応していて，これが一般に複数個存在することを反映しているからである[15]（これに関しては，後の議論を参照)．この自由度に関して，軌道上でポテンシャルの 2 階微分（バネ定数）を『局所的』に，次のように，ブロック対角化の形で表すことができる．

$$\left[\frac{\partial^2 V}{\partial q \partial q}\right]_{cl} \equiv V^{(2)} = \begin{pmatrix} V_{\rm T}^{(2)} & 0 \\ 0 & V_{\rm L}^{(2)} \end{pmatrix}.$$

これによって，局所的に 2 つの調和振動子のグループに分けることができた．そこで，ゆらぎに対する経路積分を，ガウスビーム近似との類似で調和振動子の波動関数で，横と縦の自由度のそれぞれに適用すると，

$$\begin{aligned} K^{(2)} &\to \exp[-({}^tY_{\rm T}\alpha_{\rm T}Y_{\rm T} + {}^tY_{\rm L}\alpha_{\rm L}Y_{\rm L})] \\ &= \langle y_1, \cdots, y_N | \psi_g \rangle \end{aligned} \tag{16}$$

と表せる．ただし，$\alpha_{\rm T,L} = a_{\rm T,L} + ib_{\rm T,L}$ は，それぞれ，$n \times n, m \times m$ の複素対称行列で，a は正定値にとっておく．この置き換えは，すなわち経路積分で表したものを近似的波動関数ですりかえてしまうというわけである．これは変分法の考えにほかならない．そこで，古典軌道に対する波動関数を合わせると，

$$K^{sc} \to \langle y_1, \cdots, y_N | \psi_g \rangle \times \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{sl}\right]$$

と近似的な積で書かれる．この形は一種の Born–Oppenheimer 近似と見ることができる．最後に，$V^{(2)}$ に対応するハミルトニアンを $\hat{H}^{(2)}$ とする．

以上の準備の下で，量子力学的作用関数は次のようになる：

$$S_g = \int \left\langle \varPsi_g \middle| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}^{(2)} \middle| \varPsi_g \right\rangle dt \equiv \varGamma_g - H_g.$$

幾何学的位相の部分は

$$\varGamma_g = \int {\rm Tr}\left(a_{\rm T}^{-1}\frac{db_{\rm T}}{dt}\right) dt + \int {\rm Tr}\left(a_{\rm L}^{-1}\frac{db_{\rm L}}{dt}\right) dt \tag{17}$$

のように計算できる．このように，古典軌道の自由度からくる部分と合わせると，準古典的作用関数に対応する有効作用関数は

$$S_{eff} = \int \sum_{i=1}^{N} p_i dq_i + \varGamma_g - \int H_{eff} dt$$

となる．有効ハミルトニアンは，$H_{eff} = H_{cl} + \langle \varPsi_g | H^{(2)} | \varPsi_g \rangle$ である．

ここで，特に，古典軌道が周期 T の周期軌道の場合に適用すると，S_{eff} の第 1, 2 項は，幾何学的位相の補正をされたボーア・ゾンマーフェルト型量子条件を与える[6,8]:

$$\int \sum_{i=1}^{N} p_i dq_i + \varGamma_g = 2n\hbar \tag{18}$$

($n =$ integers)．ただし，$\varGamma_g$ は，1 周期に渡って積分する．

以上のことから，Gouy 位相の対応物である $\varGamma_g$ は，いわゆる，『安定角』(stability angle) および，『ケラー・マスロフ (Keller–Maslov) 指数』(以下，KM 指数) に相当しているように見える．これに関して議論をしておこう．安定角は第 2 変分から

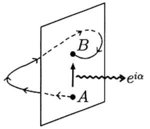


図3　1周期後の安定角の変化.

導かれるゆらぎの方程式（Jacobi 方程式）に由来する．Jacobi 方程式は，2 階の線形微分方程式系を 1 階の連立に書き直した

$$\frac{dX}{dt} = A(t)X$$

の形で書かれる．ここで，$A(t) \equiv JH^{(2)}$ で，$H^{(2)}$ は，$V^{(2)}$ に対応するハミルトニアンの第 2 変分であり，かつ $J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}$．また，$X$ は $2N$ 次元ベクトル $X = (y_1, \cdots, y_N; z_1, \cdots, z_N)$ であって，$z_i \equiv \dot{y}_i$ である．$A(t)$ は，古典軌道が周期 T の周期軌道である場合には，その周期を反映して，$A(t+T) = A(t)$ なる $2N \times 2N$ 周期行列関数となる．この解は，$X(t+T) = R(T)X(t)$，つまり，1 周期のちに $R(T)$ なる行列がかかる（いわゆる Hill–Bloch の定理）．さらに，（細かいことを一度に言うようで煩雑な感があるが），$R(T)$ は，関係式 ${}^tRJR = R$ を満たすことから，安定角は R の固有値で，$\exp[i\alpha]$ のように与えられる[6]（図 3 参照）．この事実から，$R(T)$ は，ホロノミーの一種と見ることができる．

一方，KM 指数は，1 次元の場合における WKB 近似で，turning point において波動関数の振幅が発散することと連動して，$\frac{\pi}{2}$ だけの位相の飛びが発生するという現象を多次元の場合に拡張することによって得られる概念である．これは安定角がゼロの場合，つまりゆらぎのゼロモードと関係している．保存量が m 個存在する場合，m 個のゼロモードが出現し[15]，それに対して，自由度 m の縦座標が導入されるのである．このゼロモードをガウスビーム波動関数で処理することにより，振幅の発散に関する面倒は回避されるようである．しかし，ここで与えられた幾何学的位相 Γ の表式では安定角と KM 指数を explicit に行うのは簡単ではないことを指摘しておこう．

5. 結び

ホロノミーというキーワードを標榜したが，本来の意味からかなり逸脱した内容になってしまった．ここで述べたことは，量子力学において，この独特の響きのあるキーワードがいかに意味をなすかという，いわば，筆者の願望を表明したものである．ここで展開された見方が，将来において何らかの研究のきっかけになることがあるとすれば幸いである．

本原稿のテーマの一つである，Gouy 位相については，北海道大学応用物理学教室の浜崎淳一氏，丹田聡教授よりご教示いただきました．感謝いたします．

注と参考文献

1) E. Witten, *Comm. Math. Phys.* **117** (1988) 353.
2) T. Eguchi, P.G. Gilkey and A.J. Hanson, *Phys. Rep.* **66** (1980) 213.
3) 久賀道郎,『ガロアの夢』, 日本評論社.
4) "Coherent States", J. Klauder and B. Skergerstam eds., World Scientific, 1985.
5) A. Perelomov, *Generalized Coherent States*, Springer Verlag, 1986.
6) 倉辻比呂志,『幾何学的量子力学』, シュプリンガー・ジャパン, 2005.
7) H. Kuratsuji and T. Suzuki, *Phys. Lett.* **90B** (1980) 19.
8) H. Kuratsuji and S. Iida, *Prog. Theor. Phys.* **74** (1985) 439.
9) "Geometric Phases in Physics", A. Shapere and F. Wilczek eds., World Scientific, Singapore 1989.
10) A. Yariv, *Optical electromics in modern communications*, Oxford Univ. Press, (邦訳：ヤリフ著, 多田邦男・神谷武志訳,『光エレクトロニクス』, 丸善)
11) 最近の文献として, 例えば, J. Hamazaki *et al. Opt. Express*, Y. Mineta, K. Oka and R. Morita. およびその引用文献.
12) ただし, 幾何学的な意味をもたない余分の位相が現れるがそれは省略してある.
13) V. Guillemin and S. Sternberg, Geometric Asymptotics, *Mathematical surveys 14*, American Mathematical Society, 1977.
14) M. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **12** (1971) 343.
15) R. Dashen, B. Hasslacher and A. Neveu, *Phys. Rev.* **10** (1974) 4114; *ibid*, **11** (1975) 3424.
16) 以下の内容は筆者の未発表原稿による.

（くらつじ・ひろし，立命館大学理工学部）

量子異常と位相

藤川　和男

場の量子論に現れる量子異常の位相的な側面を，2次元時空でのフェルミ粒子をボース粒子を用いて表すボソン化を例に取って説明する．量子異常の特徴を説明するために，シュレーディンガー問題に現れる幾何学的位相（ベリー位相とも呼ばれる）と量子異常の基本的な差異を実例を用いて説明する．

1. はじめに

無限個の自由度を扱う量子論である場の量子論において，量子異常という概念あるいは現象が重要になる．この現象は，場の理論における対称性という概念と密接に関係している．対称性という概念は現代物理学における最も基本的な概念であり，例えば，角運動量およびそれが保存するという事実は，空間が回転に関して一様であること，すなわち，特殊な方向というものが存在しないということと密接に関係している．もう少し抽象的な対称性としては，電荷の保存則に関係したゲージ対称性という概念がある．このように，保存則あるいは保存量という概念には対称性という概念が常に背後にある．逆に，基礎的な理論に対称性があれば必ず保存量および保存則が存在するという事実は，ネーターの定理として知られている．

この観点から言えば，量子異常とはネーターの定理が量子論では成立しない場合があるという事実を表している．古典的な考察では，対称性がありしたがって保存則が存在すると予想されるような場合でも，量子化した理論ではそのような対称性は存在せずしたがって保存量が存在しない場合があり，そのような現象は量子異常（quantum anomaly）（あるいは，歴史的な理由により，単にアノマリー（anomaly））と呼ばれる．すなわち，素朴な予想からのずれという意味である．物理学では一般にこれまでの予想からはずれた現象はアノマリーと呼ばれるので，「量子異常」というように量子化に伴った（古典論的な考察に基づく予想からの）ずれとして表現するのが正確である．

量子異常がどのような理論に現れどのような理論には現れないかは現在では良く理解されている．量子異常が現れる理論では，異常な振舞いはわれわれの取扱いに不備があるわけではなく，局所的な場の理論（特にゲージ場理論）では必然的で避けることができない現象であることが示される．この量子異常はゲージ場理論および超弦理論で矛盾のない量子論を定義するための中心的な概念として，あるいは，興味ある物理現象の背後にあるメカニズムとして多くの研究者により研究されてきた．

本解説では，より広い読者を視野に入れて，2次元の場の理論でよく知られているフェルミ粒子のボース粒子を用いた記述であるボソン化を量子異常という観点から説明したい．もしカイラル対称性に量子異常が現れないと，ボソン化が不可能であることが示される．すなわち，ボソン化は量子

異常に基礎をおいている現象である．また量子異常といわゆる幾何学的位相（ベリー位相とも呼ばれる）の基本的な違いを説明する．シュレーディンガー問題に現れる位相との違いを理解することは，同時に量子異常のより良い理解に導くと考えられるからである．

2. 2次元理論におけるカイラル対称性

物理学における基本的な対称性であり，また量子異常の考察でも基本的になるカイラル対称性を説明したい．カイラル対称性とは，ディラック方程式の導入により明らかになった新しい対称性である．複素数の導入に伴い位相という概念が導入されたが，ディラック方程式で記述されるスピナーは，さらにカイラル変換という自由度を持つわけである．

本稿では，以下の説明の関係で2次元の時空（空間1次元，時間1次元）のディラック方程式を考察する．2次元時空のディラック場は素粒子論の超弦理論でも重要であるが，物性物理学への応用でも重要であり，本稿ではこれらの応用において重要になるフェルミ場のボソン化を量子異常の観点から説明したい．

ディラック方程式に従う質量を持たないフェルミ粒子の古典的な作用積分は

$$\int \mathcal{L} dxdt = \int \bar{\psi}(t,x) i \not{D} \psi(t,x) dxdt \quad (1)$$

で与えられ，ディラック方程式は $\bar{\psi}(t,x)$ に関する変分から

$$i \not{D} \psi(t,x) = 0 \quad (2)$$

で与えられる．以下では $\psi(t,x)$ を単に $\psi(x)$ と書くことにする．ゲージ理論に現れる共変微分と呼ばれる微分は

$$\begin{aligned} \not{D} &= \gamma^\mu(\partial_\mu - iV_\mu - iA_\mu\gamma_5) \\ &= \gamma^\mu\left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} - iV_\mu - iA_\mu\gamma_5\right) \end{aligned} \quad (3)$$

で定義される．$V_\mu(x)$ と $A_\mu(x)$ はゲージ場と呼ばれ，$V_\mu(x)$ は電磁場の2次元版を与え $A_\mu(x)$ はパリティが $V_\mu(x)$ とは逆の軸性ゲージ場を定義する．結合定数はゲージ場に含めて考える．ゲージ場は一般には非アーベル的な群に関係したヤン・ミルズ場を考察するのが自然であるが，ここでは電磁場あるいはそれと類似のアーベル的な場のみを考える．座標およびゲージ場の添え字 μ は2次元時空では時間座標を表す0と空間座標に対応する1の値をとり，座標は $(x^0, x^1) = (ct, x)$ で表す．また，アインシュタインの規約という和の規則を用いる．これは，$\gamma^\mu D_\mu = \sum_{\mu=0}^{1} \gamma^\mu D_\mu$ 等を意味する．

2行2列のディラック行列 γ^μ，$\mu = 0, 1$ は，$g_{\mu\nu} = (1, -1)$ として，

$$\begin{aligned} &\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}, \\ &(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0, \\ &(\gamma^1)^\dagger = -\gamma^1 \end{aligned} \quad (4)$$

で定義され，具体的には2行2列のパウリ行列を用いて次の表示で与えられる．

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

ディラック理論で基本的となるカイラルな性質を記述する γ_5 行列は

$$\gamma_5 = \gamma^1\gamma^0, \quad \{\gamma_5, \gamma^\mu\}_+ = 0 \quad (6)$$

で定義され，現在の γ 行列の表示では具体的に

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\gamma_5)^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7)$$

で与えられる．$\psi(x)$ は

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(t,x) \\ \psi_2(t,x) \end{pmatrix} \quad (8)$$

のように2成分のスピナーである．またディラック共役を

$$\bar{\psi}(x) = \psi(x)^\dagger\gamma^0 \quad (9)$$

で定義した．

上記のディラックの作用 (1) は，まず α を実の定数として次の位相変換

$$\begin{aligned} &\psi(x) \to \psi'(x) = e^{i\alpha}\psi(x), \\ &\bar{\psi}(x) \to \bar{\psi}'(x) = \bar{\psi}(x)e^{-i\alpha} \end{aligned} \quad (10)$$

に対して形を変えない，すなわち不変である．事実

$$\int \bar{\psi}'(x) i\gamma^\mu(\partial_\mu - iV_\mu - iA_\mu\gamma_5)\psi'(x)dxdt$$
$$= \int \bar{\psi}(x) i\gamma^\mu(\partial_\mu - iV_\mu - iA_\mu\gamma_5)\psi(x)dxdt \tag{11}$$

が成立する．この位相変換はパラメターを $\alpha(x)$ に一般化すると $\partial_\mu\alpha(x)$ に比例するおつりの項を与え，$\partial_\mu\alpha(x)$ の係数としてネーターカレントが与えられる．このカレントは通常の電荷の保存則を与える．

この位相変換に加えて，ディラックの作用 (1) は β を実の定数として，次の γ_5 を含む**カイラル変換**に対しても形を変えない．

$$\begin{aligned}\psi(x) &\to \psi'(x) = e^{i\beta\gamma_5}\psi(x), \\ \bar{\psi}(x) &\to \bar{\psi}'(x) = \bar{\psi}(x)e^{i\beta\gamma_5},\end{aligned} \tag{12}$$

すなわち

$$\int \bar{\psi}'(x) i\gamma^\mu(\partial_\mu - iV_\mu - iA_\mu\gamma_5)\psi'(x)dxdt$$
$$= \int \bar{\psi}(x) i\gamma^\mu(\partial_\mu - iV_\mu - iA_\mu\gamma_5)\psi(x)dxdt \tag{13}$$

が γ_5 は γ_μ と反交換するという性質 $e^{i\beta\gamma_5}\gamma_\mu = \gamma_\mu e^{-i\beta\gamma_5}$ を用いると確認できる．

現在の例においては，局所化されたパラメター $\alpha(x)$ を含む通常の電流を生成する変換 (10) は量子論でも正しく成立し量子異常を含まない．他方パラメター $\beta(x)$ を含む局所化されたカイラル対称性に関係したカイラルカレントは量子異常を含み，量子化した理論では保存則は破れている．この差異はどこから生じるのであろうか？

ゲージ場の量子論を経路積分で書くと

$$\int \mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi \exp\left\{i\int d^2x\ \bar{\psi}(x) i\not{D}\psi(x)\right\} \tag{14}$$

の形に書けることが知られているが，このときには通常の変換 (10) を座標に依存するものに一般化した $\alpha(x)$ の場合には，場の変数の変換の下で

$$\mathcal{D}\bar{\psi}'\mathcal{D}\psi' = J\mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi \tag{15}$$

で定義されるヤコビアンは $J=1$ となり意味のあるヤコビアンを与えない．

他方，カイラル変換 (12) を座標に依存する $\beta(x)$ に一般化すると変数変換のヤコビアン $\mathcal{D}\bar{\psi}'\mathcal{D}\psi' = J_5\mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi$ は無限小の $\beta(x)$ に対しては，

$$\ln J_5(\beta)$$
$$= \frac{i}{\pi}\int d^2x\,\beta(x)\left[\partial^\mu A_\mu + \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu}(\partial_\mu V_\nu - \partial_\nu V_\mu)\right] \tag{16}$$

のように書けることが示される[1]．ただし，反対称シンボルを

$$\epsilon^{10} = 1,\ \epsilon^{01} = -1,\ \epsilon^{00} = \epsilon^{11} = 0 \tag{17}$$

で定義した．経路積分 (14) の指数関数の肩に現れる作用においてカイラル変換 (12) を β が座標に依存するように一般化したときの変化分は，

$$\int \bar{\psi}'(x) i\gamma^\mu(\partial_\mu - iV_\mu - iA_\mu\gamma_5)\psi'(x)dxdt$$
$$= \int \Big[\bar{\psi}(x) i\gamma^\mu(\partial_\mu - iV_\mu - iA_\mu\gamma_5)\psi(x)$$
$$- \partial_\mu\beta(x)\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\gamma_5\psi(x)\Big]dxdt \tag{18}$$

となり通常のネーターのカレント $j_5^\mu(x) = \bar{\psi}(x)\gamma^\mu\gamma_5\psi(x)$ が $\partial_\mu\beta$ の係数として定義される．これを経路積分の値は積分変数の名前の付け方に依らないという恒等式

$$\int \mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi \exp\left\{i\int d^2x\ \bar{\psi}(x) i\not{D}\psi(x)\right\}$$
$$= \int \mathcal{D}\bar{\psi}'\mathcal{D}\psi' \exp\left\{i\int d^2x\ \bar{\psi}'(x) i\not{D}\psi'(x)\right\} \tag{19}$$

に代入し，右辺に現れる $\beta(x)$ を含む (16) のヤコビアンと指数の中の作用に現れるネーターのカレントの発散 $\partial_\mu j_5^\mu(x)$ を足したものがゼロになるという関係から，ネーターの定理の破れ（すなわち量子異常の存在）

$$\partial_\mu j_5^\mu(x) = -\frac{1}{\pi}\left[\partial^\mu A_\mu + \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu}(\partial_\mu V_\nu - \partial_\nu V_\mu)\right] \tag{20}$$

が結論される．この考察自体は簡単であるが，実

際の計算はかなり技術的である．詳細に興味がある読者は文献 1) をご覧いただきたい．

この量子異常の考察は，ワイル（Weyl）変換と呼ばれる時空間の（短距離での角度は変えないが）長さを変える変換にも成立し，ワイル量子異常はくり込み群の β 関数と関係している．ワイル対称性は共形場理論とも密接に関係している．ワイル量子異常は，一般座標変換に関する不変性を要求すると一意的に決められ，これに反してワイル対称性を要求すると，一般座標変換に量子異常が現れる．共形場理論ではワイル不変性を強制し，したがって一般座標変換に量子異常を出す処方が採用されており，一般座標変換の量子異常はエネルギー運動量演算子の交換関係において中心拡大（central extension）として現れる[1]．

経路積分ではすべての知られている量子異常は，対称性を表す変数変換に伴い非自明なヤコビアンが現れることとして理解できることが知られている．ヤコビアンが自明な場合 $J=1$ には，素朴なネーターの定理が成立する[1]．

位相という観点からは，カイラル量子異常は 2 つの点で位相と関係している．まずカイラル変換 (12) が場の変数の位相を変える変換であることと，現れるヤコビアン (16) が $J_5(\beta)=\exp[i\int\beta\times$ anomaly] という形の位相因子を与えるという点においてである．

3. フェルミ粒子のボソン化

量子異常の応用の一つとして，2 次元時空間でのフェルミ粒子のボソン化を説明したい．相関関数の生成汎関数を経路積分

$$
\begin{aligned}
&e^{iW(v_\mu)}\\
&=\int\mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi\ \exp\left\{i\int d^2x\Big[\bar{\psi}(x)i\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)\right.\\
&\qquad\left.+v_\mu(x)\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)\Big]\right\}
\end{aligned}
\tag{21}
$$

で定義する．$W(v_\mu)$ を源 $v_\mu(x)$ で関数微分するとベクトルカレント $\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)$ の（連結した）相関関数が生成される．2 次元のベクトル量 $v_\mu(x)$ は 2 つの成分を含んでおり，一般に 2 つのスカラー量で以下のように書くことができる．

$$
v_\mu(x)=\partial_\mu\eta(x)+\epsilon_{\mu\nu}\partial^\nu\xi(x).\tag{22}
$$

この式を経路積分 (21) に代入すると，$\epsilon_{\mu\nu}\gamma^\mu=\gamma_\nu\gamma_5$ を用いて

$$
\begin{aligned}
&e^{iW(v_\mu)}\\
&=\int\mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi\ \exp\left\{i\int d^2x\bar{\psi}(x)i\gamma^\mu\Big[\partial_\mu-i\partial_\mu\eta(x)\right.\\
&\qquad\left.-i\partial_\mu\xi(x)\gamma_5\Big]\psi(x)\right\}
\end{aligned}
\tag{23}
$$

と書ける．これは式 (1) と (3) で $V_\mu=\partial_\mu\eta$ および $A_\mu=\partial_\mu\xi$ とおいたものになっている．

この式において，変換 (10) で定数の α を $\eta(x)$ に置き換えた変数の変換をすると $\eta(x)$ を指数の肩の作用から完全に取り除くことができる．

$$
\begin{aligned}
&\bar{\psi}'(x)i\gamma^\mu\Big[\partial_\mu-i\partial_\mu\eta(x)-i\partial_\mu\xi(x)\gamma_5\Big]\psi'(x)\\
&=\bar{\psi}(x)i\gamma^\mu\Big[\partial_\mu-i\partial_\mu\xi(x)\gamma_5\Big]\psi(x).
\end{aligned}
\tag{24}
$$

このときに，変数変換のヤコビアン (15) が 1 になり，完全に変数 $\eta(x)$ を経路積分 (23) から消去できる．同様に，カイラル変換 (12) で β を $\xi(x)$ で置き換えた変数変換を行うと

$$
\begin{aligned}
&\bar{\psi}'(x)i\gamma^\mu\Big[\partial_\mu-i\partial_\mu\xi(x)\gamma_5\Big]\psi'(x)\\
&=\bar{\psi}(x)i\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)
\end{aligned}
\tag{25}
$$

となり，経路積分 (23) の指数に現れる作用から変数 $\xi(x)$ も消去できる．しかし，現在のカイラル変換の場合にはヤコビアン (16) が現れ，経路積分から変数 $\xi(x)$ を完全には消去できない．

具体的には，ヤコビアン (16) で $V_\mu=0$ とし $A_\mu=\partial_\mu\xi(x)$ としたものが現れるが，(16) は無限小の $\beta(x)$ で成立することに注意する必要がある．(16) で $\beta(x)=\delta\xi(x)$ とするとヤコビアンは

$$
J_5(\delta\xi)=\exp\left\{\frac{i}{\pi}\int d^2x\delta\xi(x)\partial^\mu\partial_\mu\xi(x)\right\}\tag{26}
$$

で与えられる．無限小の $\delta\xi(x)$ を繰り返し行い作用から完全に $\xi(x)$ に取り除いた結果としてのヤ

コビアンの計算は以下の手順で行われる：パラメター s を導入し $\delta\xi(x) = ds\xi(x)$ と書き，ある程度変換を繰り返した段階での作用の中に現れる A_μ を $(1-s)\partial_\mu\xi(x)$ と書くと作用から $\xi(x)$ に取り除いた結果としてのヤコビアンは

$$
\begin{aligned}
&J_5(\xi)\\
&= \exp\left\{\frac{i}{\pi}\int d^2x \int_0^1 ds\ \xi(x)\partial^\mu\partial_\mu(1-s)\xi(x)\right\}\\
&= \exp\left\{\frac{i}{\pi}\int d^2x\ \frac{1}{2}\xi(x)\partial^\mu\partial_\mu\xi(x)\right\}\\
&= \exp\left\{\frac{i}{2\pi}\int d^2x\ (\epsilon^{\mu\nu}\partial_\mu v_\nu)\frac{1}{\partial^\mu\partial_\mu}(\epsilon^{\mu\nu}\partial_\mu v_\nu)\right\}
\end{aligned}
\tag{27}
$$

で与えられる．ただし v_μ の分解式 (22) から得られる

$$
\partial^\mu\partial_\mu\xi = \epsilon^{\mu\nu}\partial_\mu v_\nu, \quad \xi = \frac{1}{\partial^\mu\partial_\mu}\epsilon^{\mu\nu}\partial_\mu v_\nu \tag{28}
$$

を用いた．

このようにして経路積分 (21) は

$$
\begin{aligned}
e^{iW(v_\mu)} = J_5(\xi)\int \mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi\\
\times \exp\left\{i\int d^2x\left[\bar{\psi}(x)i\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)\right]\right\}
\end{aligned}
\tag{29}
$$

となり，v_μ 依存性はすべてヤコビアンに含まれる．すなわち，もし量子異常がなければフェルミ粒子の経路積分は定数を与え，v_μ に関して微分するとゼロになり物理的に意味のある結果が得られないことがわかる．ヤコビアン $J_5(\xi)$ の物理的な意味を明確にするために，$W(v_\mu)$ は経路積分を定数（現在の場合自由なフェルミ粒子の経路積分）で割っても物理的な意味が変わらないことに注意して，ボソン場 $\varphi(x)$ を導入して

$$
\begin{aligned}
&e^{iW(v_\mu)}\\
&=\int\mathcal{D}\varphi\exp\left\{i\int d^2x\left[\frac{1}{2}\partial^\mu\varphi\partial_\mu\varphi+\varphi\frac{1}{\sqrt{\pi}}\partial_\nu v_\mu\epsilon^{\mu\nu}\right]\right\}\\
&=\int\mathcal{D}\varphi\exp\left\{i\int d^2x\left[\frac{1}{2}\partial^\mu\varphi\partial_\mu\varphi-v_\mu\frac{1}{\sqrt{\pi}}\epsilon^{\mu\nu}\partial_\nu\varphi\right]\right\}
\end{aligned}
\tag{30}
$$

のように書き換える．すなわち，φ に関して経路積分すると元のヤコビアン $J_5(\xi)$ が得られるように書き換える．

経路積分 (21) と経路積分 (30) を比較すると，相関関数の生成汎関数がフェルミ粒子の経路積分からボース粒子の経路積分に書き換えられたことがわかる．すなわち**フェルミ粒子のボース化**が行われたことになり，源 $v_\mu(x)$ の係数を比較して

$$
\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x) \leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{\pi}}\epsilon^{\mu\nu}\partial_\nu\varphi(x) \tag{31}
$$

の対応関係がフェルミ粒子を用いた記述とボース粒子を用いた記述の間にあることがわかる．経路積分を源 $v_\mu(x)$ に関して 2 回微分して $v_\mu(x)=0$ とおくと，相関関数の間の関係

$$
\begin{aligned}
&\left\langle T^\star\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)\bar{\psi}(y)\gamma^\nu\psi(y)\right\rangle\\
&= \frac{1}{\pi}\left\langle T^\star\epsilon^{\mu\alpha}\partial_\alpha\varphi(x)\epsilon^{\nu\beta}\partial_\beta\varphi(y)\right\rangle
\end{aligned}
\tag{32}
$$

が結論される．ただし，$T^\star$ は時間順序積である．なお，質量 0 のスカラー場は（無限に広がった）2 次元時空では赤外発散のために存在できない．このため，上記のボソン化は体積有限な系（例えば，空間は閉じており時間軸方向には伸びているシリンダー上）における共形場理論の枠組みで理解するのが正しい．量子異常は，場の理論の局所的な性質のみに依っていることが示され，したがって体積有限な共形場理論との相性は非常によい．

以上から，ボソン化は場の理論における対称性という観点からは量子異常を本質的に用いていることがわかるが，この性質は非アーベル的なボソン化というものを考えるとより明確になる．現在のいわゆるアーベル的なボソン化では，カイラル変換に付随したヤコビアン (16) のうちの反対称シンボル $\epsilon^{\mu\nu}$ に比例する部分が役割を演じなかった．代わりに，通常のゲージ理論の分析では局所的相殺項で相殺されると考えられているヤコビアンの第一項がボソン場の運動量項を与える．この項はボソン化では局所的な相殺項では引き去ることができないことは，ヤコビアン (27) から明らかである．非アーベル的なボソン化を考えると，ヤコビアンの第一項は非線形シグマ模型の運動量項

を与え，$\epsilon^{\mu\nu}$ に比例する項がトポロジカルな意味を持ち得る Wess–Zumino 項を与え，ボソン化された理論全体は Wess–Zumino–Witten 模型と呼ばれている．

量子異常の計算および非アーベル的なボソン化の詳細に関しては文献 1) をご覧いただきたい．

4. 幾何学的位相との基本的差異

量子異常と幾何学的位相と呼ばれる（ベリー位相とも呼ばれる）シュレーディンガー問題での位相との類似性が議論されることもあるが，これらの 2 つの概念は根本的に異なっていることを説明したい[2)]．2 つの概念の違いを説明することにより，場の理論における量子異常の本質もより深く理解できると考えるからである．

量子異常と幾何学的位相の類似性に関しては M. Stone[3)] によるモデル

$$H = \frac{\vec{L}^2}{2I} - \mu\vec{n}(t)\cdot\vec{\sigma} \tag{33}$$

がよく引き合いに出されるのでこのモデルを用いて差異を説明したい．ここで $\vec{n}(t)$ はパウリ行列 $\vec{\sigma}$ で表されるスピンに働く“磁場”の役割をし $\vec{L}$ は $\vec{n}(t)$ の回転を引き起こすとされる．しかし，モデルの物理的な内容は以下の考察では必要ではない．2 成分のスピナー ψ を導入すると，ハミルトニアンは

$$H(t) = \frac{\vec{L}^2}{2I} - \psi^\dagger\mu\vec{n}(t)\cdot\vec{\sigma}\psi \tag{34}$$

と書ける．

時間発展の演算子を経路積分表示すると[3)]

$$\left\langle f\middle|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^T H\,dt\right]\middle|i\right\rangle$$
$$= \int\mathcal{D}\vec{n}\mathcal{D}\psi^\dagger\mathcal{D}\psi\ \delta(\vec{n}^2-1)$$
$$\times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^T dt\left[\frac{\dot{\vec{n}}^2}{2I} + \psi^\dagger i\hbar\partial_t\psi + \psi^\dagger\mu\vec{n}(t)\cdot\vec{\sigma}\psi\right]\right\} \tag{35}$$

となり，スピナーに関する積分は (14) と類似の形をとる．この経路積分は $U^\dagger(\vec{n}(t))\vec{n}(t)\vec{\sigma}U(\vec{n}(t)) = |\vec{n}|\sigma_3$ を満たす変数変換（ユニタリー変換）

$$\psi(t) = U(\vec{n}(t))\psi'(t),\quad \psi^\dagger(t) = \psi'^\dagger(t)U^\dagger(\vec{n}(t)) \tag{36}$$

を行うと

$$\int\mathcal{D}\vec{n}\mathcal{D}\psi'^\dagger\mathcal{D}\psi'\ \delta(\vec{n}^2-1)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^T dt\left[\frac{\dot{\vec{n}}^2}{2I} + \psi'^\dagger\Big(i\hbar\partial_t + \mu\sigma_3 + U^\dagger(\vec{n}(t))i\hbar\partial_t U(\vec{n}(t))\Big)\psi'\right]\right\} \tag{37}$$

と書ける．現在の 2 自由度の問題ではヤコビアンは 1 になり $\mathcal{D}\psi^\dagger\mathcal{D}\psi = \mathcal{D}\psi'^\dagger\mathcal{D}\psi'$ が成立する．ユニタリー変換の具体形は，極座標表示 $n_1 = |\vec{n}|\sin\theta\cos\varphi$, $n_2 = |\vec{n}|\sin\theta\sin\varphi$, $n_3 = |\vec{n}|\cos\theta$ を用いて

$$\mu\vec{n}(t)\vec{\sigma}v_\pm(\vec{n}) = \pm\mu|\vec{n}|v_\pm(\vec{n}) \tag{38}$$

を満たす $v_\pm(\vec{n})$ を定義すると，$U(\vec{n}(t))$ は 2 成分のベクトルを 2 つ並べた 2×2 の行列

$$U(\vec{n}(t)) = \begin{pmatrix} v_+(\vec{n}) & v_-(\vec{n}) \end{pmatrix} \tag{39}$$

で与えられる．

上記の経路積分 (35) と (37) は，経路積分では積分変数の名前の付け方は任意であるので，2 つのラグランジャン

$$L = \frac{\dot{\vec{n}}^2}{2I} + \psi^\dagger i\hbar\partial_t\psi + \psi^\dagger\mu\vec{n}(\tau)\cdot\vec{\sigma}\psi \tag{40}$$

と

$$L' = \frac{\dot{\vec{n}}^2}{2I} + \psi^\dagger\Big(i\hbar\partial_t + \mu\sigma_3 + U(\vec{n}(t))\Big)^\dagger i\hbar\partial_t U(\vec{n}(t))\psi \tag{41}$$

は物理的には同等であることを示している．この同等性には，経路積分の測度，したがって量子論の本質的な部分の寄与が含まれていない．すなわち，古典論での変数の置き換えにのみ依存している．もし現在の問題に量子異常が現れるとするなら，(41) に Wess–Zumino 項が付け加わることに

なる．式 (16) 参照．

上記の 2 つのラグランジャン (40) と (41) の同等性から，変数 $\vec{n}(t)$ を固定したときには，出発点のハミルトニアン (34) は

$$
\begin{aligned}
&H_{\rm fermion}(t) \\
&= -\psi^\dagger\left[\mu\sigma_3 + U^\dagger(\vec{n}(t))i\hbar\partial_t U(\vec{n}(t))\Big|_{|\vec{n}|=1}\right]\psi
\end{aligned}
\tag{42}
$$

と同等になる．ここで ψ は

$$
\psi = \begin{pmatrix} b_+(t) \\ b_-(t) \end{pmatrix} \tag{43}
$$

の形をしている．あるいは (33) の記法では

$$
\begin{aligned}
H_{\rm fermion} &= -\mu\sigma_3 \\
&\quad - U^\dagger(\vec{n}(t))i\hbar\partial_t U(\vec{n}(t))|_{|\vec{n}|=1}
\end{aligned}
\tag{44}
$$

と同等になる．(44) の最後のゲージ変換項に対応する項が "幾何学的位相項" と呼ばれている．すなわち，幾何学的位相項はハミルトニアンの一部である．また．この幾何学的位相項のトポロジーは，正確な扱いにおいては，トリビアルであることが示される[4]．

ハミルトニアン (42) から明らかなように，幾何学的位相はフェルミ粒子の場で挟まれた表式の中に現れる．これは，量子異常では元のラグランジャンに新しいラグランジャン (Wess–Zumino 項) が付け加わっていたことを思い起こすと，根本的に異なっていることがわかる．新しい項として付け加わるため，量子異常は Fock 空間のすべてのフェルミ粒子状態に同じ形で現れる．すなわち，Fock 空間のある一部に限定すると量子異常が現れないというような現象は存在しない．他方，幾何学的位相の場合には，Fock 空間の状態により形が変わる．

具体的には，μ が十分大きく，T をゆっくりと動く変数 $\vec{n}(t)$ の周期とし $2\mu T \gg 2\pi\hbar$, を満たすときには，幾何学的な項の非対角成分は無視できる (断熱近似)．スピナーに対するハミルトニアン (42) はゆっくり動く変数の 1 周期に対して力学的な位相

$$
\begin{aligned}
&\left\langle 0\left| b_+ \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^T dt\; H_{\rm fermion}(t)\right\} b_+^\dagger \right| 0\right\rangle \\
&= \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\mu T + i\oint \frac{(1+\cos\theta)}{2}d\varphi\right\}
\end{aligned}
\tag{45}
$$

を与え[2]，指数の中の第 2 項がベリー位相と呼ばれるものを与える．M. Stone の論文[3]では，(45) の第 2 項がラグランジャン (41) の第 1 項 $\dot{\vec{n}}^2/(2I)$ に対する "Wess–Zumino 項" と同定できるという議論がされているが，上記の導出から Wess–Zumino 項とは似て非なるものであることが明らかである．

他方，上のエネルギー状態 (第 2 量子化の言葉では $b_-^\dagger|0\rangle$) を考えると，(45) で $1+\cos\theta \to 1-\cos\theta$ (および，$\mu \to -\mu$) と置き換えた幾何学的位相が現れる．さらに，2 粒子状態 $b_+^\dagger b_-^\dagger|0\rangle$ を考えると，幾何学的位相はトリビアルになることが確かめられる[2]．この性質も，Wess–Zumino 項は Fock 空間の状態，$b_+^\dagger|0\rangle, b_-^\dagger|0\rangle, b_+^\dagger b_-^\dagger|0\rangle$ 等により形を変えないという性質とは正反対の性質である．

5. おわりに

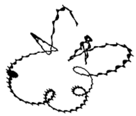
量子力学における位相という概念は多様な現象に関係している．本稿では，量子異常という場の量子論に現れる現象の位相的な側面とその応用としての 2 次元の場の理論におけるボソン化を説明した．また，量子異常の特性を説明するために，シュレーディンガー問題に現れる幾何学的位相との基本的な差異も説明した．

参考文献

1) K. Fujikawa and H. Suzuki, *Path Integrals and Quantum Anomalies*, (Oxford University Press, 2004).
2) K. Fujikawa, *Phys. Rev. D* **73** (2006) 025017.
3) M. Stone, *Phys. Rev. D* **33**, 1191 (1986).
4) S. Deguchi and K. Fujikawa, *Phys. Rev. A* **721** (2005) 012111.

(ふじかわ・かずお，日本大学理工学部)

位相的場の理論



江口　徹

1. はじめに

位相的場の理論（topological field theory）と呼ばれる一群の理論が 80 年代後半にウィッテン（E. Witten）によって導入されました[1,2]．これらの理論は超対称性（supersymmetry）を持つ場の理論から出発して，量子数を読み直す（ツイストする）一定の手続きで構成することができ，理論の相関関数は種々の位相不変量を表します．ゲージ理論などの場の理論やある種の量子力学系ではインスタントンやボーテックス，ベリー位相などのトポロジカルな効果が理論に存在することが広く知られていますが，位相的場の理論ではこうした側面を特に強調して，もっぱらトポロジカルな効果を記述する場の理論を考えます．

ご存知のように超対称性はボソンとフェルミオンの自由度を入れ替える対称性ですが，超対称性は一般には平坦な時空の上の理論でしか定義されません．これを曲がった時空の上でも定義するには重力場を導入しこれと結合させる必要があります．この場合には，超重力理論（一般相対性理論を超対称性を持つように拡張した理論）と結合した，局所的な超対称性を持つ理論が得られます．

一方，位相的場の理論は重力場を導入することなしに曲がった空間上で超対称性をもつ理論を作る別の方法を与えます．ただし，このためには元々の理論が拡張された超対称性（1 種類以上の超対称性）を持つことが必要で，またツイスト（twist）により超対称性は性格を変えて **BRS 対称性**と呼ばれるものに変化します．

位相的場の理論には次のような著しい特徴があります．

1. 理論を経路積分を用いて量子化すると，経路積分への寄与が理論の鞍点からくるものに限られます．これを（経路積分の）**局在化**（localization）と呼びます．局在化のため経路積分は有限次元の積分に帰着します．またこのとき理論の WKB 近似が厳密に正しい結果を与えます．

2. BRS 対称性はゲージ対称性の一種ですが，その変換の生成子を Q と呼ぶと Q はフェルミオン的な演算子でその 2 乗が零になる

$$Q^2 = 0 \tag{1}$$

という特徴があります．位相的場の理論のエネルギー運動量テンソル $T_{\mu\nu}$ はあるフェルミオン的な演算子 $\Lambda_{\mu\nu}$ を用いて，

$$T_{\mu\nu} = \{Q, \Lambda_{\mu\nu}\} \equiv Q\Lambda_{\mu\nu} + \Lambda_{\mu\nu}Q \tag{2}$$

と表すことができます．この関係は，エネルギー運動量テンソルは演算子 $\Lambda_{\mu\nu}$ のゲージ変換になっていると解釈されます．このため，位相的場の理論では系のエネルギーや運動量はゲージ変換の自由度となり，物理的な意味を持たなくなります．量子論では運動量は位置に関する微分なので，例えば相関関数 $\langle\phi(x)\phi(y)\rangle$ のよう

なものを考えると，位相的場の理論ではこの量は位置 x や y に本質的に依存しなくなります．唯一の依存性は x と y が等しいかどうかだけになり，

$$\langle\phi(x)\phi(y)\rangle = \begin{cases} c_1, & x \neq y, \\ c_2, & x = y \end{cases} \qquad (3)$$

ここで定数 c_1, c_2 は位相不変量を表します．

ウィッテンはまず 4 次元空間 M 上の $\mathcal{N}=2$ 超対称性（2 種類の超対称性）を持つゲージ理論をツイストして得られる位相的場の理論を構成しました[1)]．この理論は空間 M の（可微分構造の）位相不変量，すなわち**ドナルドソン不変量**を記述する理論を与えます．さらに，ウィッテンは $\mathcal{N}=2$ 超対称性を持つ 2 次元の非線形シグマ模型をツイストしてトポロジカル・シグマ模型（あるいは A モデル）と呼ばれる理論を定義しました[2)]．シグマ模型は 2 次元時空から標的空間と呼ばれる空間 M への写像の足し上げで定義されますが，トポロジカル・シグマ模型は M の中への正則写像の足し上げを与えます．これは M の（シンプレクティック構造の）不変量，**グロモフ・ウィッテン不変量**を記述します．

一方，$\mathcal{N}=2$ 超対称性を持つ共形不変な場の理論を調べると，これらの模型をツイストすることにより，多くの位相的場の理論のモデルが得られることが分かります[3)]．

理論が共形不変性を持つ場合には，理論の正則成分と反正則成分が独立に振る舞うため，ツイストに 2 種類の可能性が生じます．このため，A モデル（トポロジカル・シグマ模型）の他に B モデルと呼ばれる理論を導入することができます[4)]．超弦理論も $\mathcal{N}=2$ 超対称性を持つ共形場の理論の一種なので，これをツイストして位相的場の理論が得られますが，これは位相的弦理論（トポロジカル・ストリング）と呼ばれています．トポロジカル・ストリングにおいてはその A モデルと B モデルの間に**ミラー対称性**と呼ばれる著しい関係があり，弦理論の研究や現代数学の研究に大きなインパクトを与えました．

ウィッテンによって導入された当時，位相的場の理論はかなり人工的な場の理論のモデルであり，実際の物理に役に立つかどうか疑わしい印象を与えました．しかし，研究が進むにつれて，様々な系の持つ幾何学的な特徴を簡潔に取り出してみせる位相的場の理論の手法の有用性が次第に明らかになってきました．特に，最近トポロジカル・ストリングの理論には大きな進展があり，4 次元のゲージ理論のインスタントンの足し上げや[5)]，ブラックホールのエントロピーの議論などに密接な関係があること[6)]が明らかになってきています．

また，量子計算機の設計などにおいても，量子相関が乱されることなく安定に存在する状況として種々のトポロジカルな配位を用いる可能性が議論されており，位相的場の理論の応用が考えられています．

2. 局所化と BRS 対称性

位相的場の理論の特徴，特に局所化の現象を見るために，ここではまず一番簡単な場合として一変数の積分の問題を考えましょう．このモデルは以前，本誌の量子化に関する特集で議論したものです[7)]．次の積分を調べましょう．

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}V(x)^2\right) \cdot \frac{dV}{dx}. \quad (4)$$

ここで $V(x)$ は変数 x の勝手な関数とします．Z の値は関数 $V(x)$ の振舞いによります．もし $V(x)$ が図 1 のような関数であれば $x \to \pm\infty$ で $V(x) \to \pm\infty$ で

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2}V(x)^2\right) \cdot \frac{dV}{\sqrt{2\pi}} = 1 (5)$$

となります．一方，$V(x)$ が図 2 のような関数であれば $x \to \pm\infty$ で $V(x) \to +\infty$．したがって

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2}V(x)^2\right) \cdot \frac{dV}{\sqrt{2\pi}} = 0 (6)$$

となります．すなわち関数 $V(x)$ を

$$V(x) = ax^n + \text{低次の項} \quad (a \text{ は定数}) \quad (7)$$

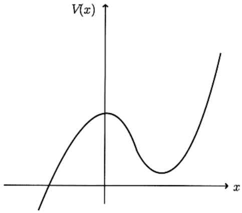


図 1　n が奇数の場合.

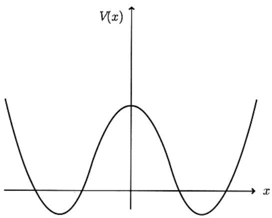


図 2　n が偶数の場合.

と表すとき $n=$ 奇, 偶に従って $Z=1,0$ となります.

Z の値は $V(x)$ の無限遠での振舞いのみによりその詳細にはよりません. 特に $V(x)$ を定数倍 $V(x)\to tV(x)$ しても Z は変化しません. そこで

$$Z=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}t^2V(x)^2\right)\cdot\frac{tdV}{dx} \quad (8)$$

として, 上の量を $t\to\infty$ で調べましょう. t が大きくなると指数関数の肩が負で大きくなるため被積分関数は $V(x)\neq 0$ のときにはゼロになります. したがって $t\to\infty$ の極限では積分は $V(x)$ の零点 $\{x_i\}$ のみに集中して

$$Z=\lim_{t\to\infty}\sum_i\int\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[\frac{-1}{2}t^2\left(\frac{dV}{dx}(x-x_i)+\frac{1}{2}\frac{d^2V}{dx^2}(x-x_i)^2+\cdots\right)\right]\times t\frac{dV}{dx} \quad (9)$$

$$=\lim_{t\to\infty}\sum_i\left[\frac{\left.\frac{dV}{dx}\right|_{x_i}}{\left|\frac{dV}{dx}\right|\Big|_{x_i}}+O(t^{-2})\right] \quad (10)$$

$$=\sum_i\mathrm{sign}\left(\frac{dV}{dx}\right)\Bigg|_{x_i}=\sum_i\pm 1 \quad (11)$$

となります.

(11) では元々 $\pm\infty$ にわたった積分が $V(x)$ の零点からの離散的な和に置き換えられています. こうした事情が積分の局在化 (localization) と呼ばれます. $V(x)=0$ は積分 (4) の鞍点にあたり (11) は鞍点からの寄与の和が厳密な結果を与えることを示しています. すなわち, 積分が局在化するとき WKB 近似 (鞍点) が正しい答えを与えることになります.

次に反可換な変数を導入して, 系をフェルミオン的対称性を持つものに書き改めましょう. ここでは反可換な量 ρ,χ を考えます. 反可換というのは互いに入れ替えたときにマイナス符号が出るということで, すなわち $\rho\chi=-\chi\rho$ が成り立ちます. 特に自分自身を入れ替えてもマイナス符号が出るので 2 乗すると零になるという性質を持ちます. すなわち, $\rho^2=-\rho^2=0$, 同様に $\chi^2=0$ が成り立ちます.

また反可換な量に関する積分は次の規則で定めます.

$$\int d\rho=0,\int d\chi=0,\int d\rho\,\rho=1,\int d\chi\,\chi=1. \quad (12)$$

すると

$$\int d\chi d\rho\exp\left(\rho\frac{dV}{dx}\chi\right)=\frac{dV}{dx} \quad (13)$$

が成り立ちます. 実際, 指数関数を展開すると $\rho\frac{dV}{dx}\chi$ の項だけが積分に寄与することが分かり (12) を用いると (13) が導かれます. この表示を用いると Z は次のように書き直されます.

$$Z=\int\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}d\chi\,d\rho\exp\left(-\frac{1}{2}V(x)^2+\rho\frac{dV}{dx}\chi\right). \quad (14)$$

(14) は最も簡単な位相的場の理論のモデルになっています. まず次のような変換, BRS 変換を考えましょう.

$$\delta x=\chi,\quad \delta\rho=V(x),\quad \delta\chi=0. \quad (15)$$

指数関数の肩をラグランジアン L とみなしますと

$$L=-\frac{1}{2}V(x)^2+\rho\frac{dV}{dx}\chi. \quad (16)$$

L は上の BRS 変換で不変です.

$$\delta L = -V(x)\delta V(x) + \delta\rho\frac{dV}{dx}\chi + \rho\delta\frac{dV}{dx}\chi$$
$$= -V(x)V'(x)\chi + V(x)V'(x)\chi = 0. \quad (17)$$

BRS 変換は可換な量を反可換な量に変換し，また反可換な量を可換な量へと変換します．したがって BRS 変換はフェルミオン的な対称性であり超対称性と密接に関係しています．BRS 対称性の特徴は BRS 変換を 2 度続けて施すと零になるという性質です．実際

$$\delta^2 x = \delta\chi = 0, \quad (18)$$

$$\delta^2 \rho = \delta V(x) = V'(x)\chi = 0. \quad (19)$$

ここでラグランジアン L から導かれる運動方程式 $\frac{\partial L}{\partial \rho} = V'(x)\chi = 0$ を用いました．

鞍点 $V(x) = 0$ は BRS 変換 (15) では反可換量 ρ の BRS 変換に関する固定点として解釈されます．このように位相的場の理論では BRS 固定点に積分が局在することが示されます．

3. 位相的共形場の理論

次に簡単な場合として共形場の理論を議論しましょう．(平坦な) 2 次元空間上の場の理論を考えます．エネルギー運動量テンソルを $T_{\mu\nu}(x_1, x_2)$ としましょう．ここで $\mu, \nu = 1, 2$ です．まず，エネルギー，運動量は保存するので

$$\sum_{\mu=1}^{2} \partial_\mu T_{\mu\nu} = 0, \quad \nu = 1, 2. \quad (20)$$

さらに，スケール不変性からくる条件，$T_{\mu\nu}$ のトレースが零

$$\sum_{\mu=1}^{2} T_{\mu\mu} = 0 \quad (21)$$

を仮定します．すると上の 2 式はまとめて

$$\partial_{\bar{z}} T_{zz} = 0, \quad \partial_z T_{\bar{z}\bar{z}} = 0, \quad T_{z\bar{z}} = 0 \quad (22)$$

と書き直すことができます．ここで $T_{z\nu} \equiv T_{1\nu} - iT_{2\nu}$, $\partial_{\bar{z}} \equiv \partial_{x_1} + i\partial_{x_2}$ などと定義しました．

すなわち，T の zz 成分は正則関数，$\bar{z}\bar{z}$ は反正則関数になります．この事情を添字を省略して

$$T_{zz} = T(z), \quad T_{\bar{z}\bar{z}} = \bar{T}(\bar{z}) \quad (23)$$

と書くことにしましょう．$T(z)$ は複素平面上で正則ですが，点 w に $T(w)$ が存在すると，w に近づいたときに特異性が生じます．この関係をオペレータ積展開（Operator Product Expansion, OPE）と呼びます．

$$T(z)T(w) = \frac{c}{2}\frac{1}{(z-w)^4} + \frac{2T(w)}{(z-w)^2} + \frac{\partial_w T(w)}{z-w} + \text{regular}. \quad (24)$$

regular と書いた項は特異性を持たないという意味です．すなわち，積 $T(z)T(w)$ には 4 次，2 次，1 次の特異性があり，4 次の極の留数は定数，2 次の極の留数はエネルギー運動量テンソルの 2 倍，1 次の極の留数はエネルギー運動量テンソルの微分になります．初項の係数 c はセントラル・チャージ（中心電荷）と呼ばれ，共形場の理論を一つ固定すると定まる定数です．一般に共形場の理論にユニタリー性（正値性）を課すと c の取り得る値に強い制限がつくことが知られています．regular な項の形は共形場の理論によって異なり，特異性を持つ項のような普遍的な形は持ちません．

$\bar{T}$ どうしの間にも全く同様なオペレーター積展開が成り立ちます．

$$\bar{T}(\bar{z})\bar{T}(\bar{w}) = \frac{c}{2}\frac{1}{(\bar{z}-\bar{w})^4} + \frac{2\bar{T}(\bar{w})}{(\bar{z}-\bar{w})^2} + \frac{\partial_{\bar{w}}\bar{T}(\bar{w})}{\bar{z}-\bar{w}} + \text{regular}. \quad (25)$$

T と $\bar{T}$ は近づいても特異性を出しません．このため，T と $\bar{T}$ を独立に取り扱って理論を調べることができます．このように，共形場の理論では正則な成分と半正則な成分に理論が分解します．

共形場の理論に現れる場 $\boldsymbol{\Phi}$ は $\boldsymbol{\Phi}(z, \bar{z}) = \phi(z)\bar{\phi}(\bar{z})$ のように正則成分と反正則成分の積に分解します．場 ϕ とストレス・テンソル T の OPE は

$$T(z)\phi(w) = \frac{h\,\phi(w)}{(z-w)^2} + \frac{\partial_w \phi(w)}{z-w} + \text{regular} \quad (26)$$

で与えられます．定数 h は場 ϕ の共形次元と呼ばれます．$\bar{\phi}$ と $\bar{T}$ の間に関しても全く同様な関係が成り立ちます．セントラル・チャージの項を無

視するとストレス・テンソル T 自体は共形次元=2の共形場 ϕ と同じ形のオペレーター積を持っています．

上に挙げたオペレーター積(24), (26)では左側にある作用素の位置 z は右側にある作用素の位置 w より大きな絶対値 $|z|>|w|$ を持つという規約に従っています．共形場の理論では座標の動径方向を時間と見立てるため，$|z|>|w|$ は通常の場の理論における時間順序積に相当しています．

次に，超対称性を持つ共形場を考えましょう．このために超対称作用素 $G, \bar{G}$ を導入します．$G, \bar{G}$ は2次元のフェルミオンが持つ2つの独立な成分に対応し，それぞれ $z, \bar{z}$ のみに依存します．$\mathcal{N}=2$ 超共形場の理論には2倍の数の超対称作用素が存在します．これらを $G(z), G^*(z); \bar{G}(\bar{z}), \bar{G}^*(\bar{z})$ と呼びましょう．オペレーター積は

$$T(z)G(w)=\frac{3}{2}\frac{G(w)}{(z-w)^2}+\frac{\partial_w G(w)}{z-w}+\text{regular}, \tag{27}$$

$$T(z)G^*(w)=\frac{3}{2}\frac{G^*(w)}{(z-w)^2}+\frac{\partial_w G^*(w)}{z-w}+\text{regular}, \tag{28}$$

$$G(z)G(w)=\text{regular}, \tag{29}$$

$$G^*(z)G^*(w)=\text{regular}, \tag{30}$$

$$G(z)G^*(w)=\frac{\frac{c}{3}}{(z-w)^3}+\frac{2J(w)}{(z-w)^2}+\frac{2T(w)+\partial_w J(w)}{z-w}+\text{regular} \tag{31}$$

で与えられます．すなわち，超対称作用素 G, G^* は共形次元3/2の場で，G どうし，G^* どうしのオペレーター積は特異性を持ちません．(31)に現れる作用素 J は共形次元1の場で $U(1)$ カレントと呼ばれます．J を含むオペレーター積は

$$J(z)J(w)=\frac{c}{3}\frac{1}{(z-w)^2}+\text{regular}, \tag{32}$$

$$J(z)G(w)=\frac{G(w)}{z-w}+\text{regular}, \tag{33}$$

$$J(z)G^*(w)=-\frac{G^*(w)}{z-w}+\text{regular} \tag{34}$$

で与えられます．c はセントラル・チャージです．カレント J に対して電荷 J_0 を $\oint J(z)dz$ で定義すると，

$$[J_0, G(w)]=G(w), \quad [J_0, G^*(w)]=-G^*(w). \tag{35}$$

すなわち G と G^* は反対符号の $U(1)$ 電荷を持ちます．一般に共形場の理論の作用素のモード展開は

$$\boldsymbol{\Phi}(z)=\sum_{r\in\boldsymbol{Z}}\boldsymbol{\Phi}_r z^{-r-h} \tag{36}$$

の形を持ちます．ここで h は場 $\boldsymbol{\Phi}$ の共形次元です．モーディング r は通常整数値をとりますが，超対称作用素 G, G^* の場合には理論のセクターによって異なり，Ramond sectorでは整数値，NS sectorでは半整数値をとります．

さて，G と G^* のOPE(31)の1次の極に現れるコンビネーション $T+\frac{1}{2}\partial J$ に注目しましょう．これを新しいストレス・テンソル T' と見なします．

$$T'=T+\frac{1}{2}\partial J. \tag{37}$$

これが $\mathcal{N}=2$ 共形場の理論における量子数の読み替え（ツイスト）になります．T' どうしのOPEは

$$T'(z)T'(w)=\frac{2T'(w)}{(z-w)^2}+\frac{\partial_w T'(w)}{z-w} \tag{38}$$

となって，中心電荷の項が消えていることが分かります．また T' と G, G^* のOPEは

$$T'(z)G(w)=\frac{G(w)}{(z-w)^2}+\frac{\partial_w G(w)}{z-w}, \tag{39}$$

$$T'(z)G^*(w)=\frac{2G^*(w)}{(z-w)^2}+\frac{\partial_w G^*(w)}{z-w} \tag{40}$$

となり，新しいストレス・テンソルに対して G は共形次元=1，G^* は共形次元=2を持つことが分かります．すると（Ramondセクターで）G, G^* はモード展開

$$G(z)=\sum_{r\in\boldsymbol{Z}}G_r z^{-r-1}, \quad G^*(w)=\sum_{r\in\boldsymbol{Z}}G_r^* w^{-r-2} \tag{41}$$

を持ちます．そこで(31)で z を w の周りで積分すると

$$\{G_0, G^*(w)\} = 2T'(w) \tag{42}$$

を得ます．一方，(29) を z, w で積分すると

$$G_0{}^2 = 0 \tag{43}$$

を得ます．(42), (43) を見ると，今考えている系がちょうど位相的場の理論の例を与えていることが分かります．すなわち，G_0 を BRS 作用素 Q と見なすと

$$Q^2 = 0, \tag{44}$$

また，エネルギー運動量テンソルは

$$T'(z) = \left\{Q, \frac{1}{2}G^*(z)\right\} \tag{45}$$

の形を持ち，超対称作用素 G^* のゲージ変換になっています．

(37) では，ツイスト

$$T \Longrightarrow T + \frac{1}{2}\partial J \tag{46}$$

を考えましたが，$\mathcal{N} = 2$ 共形場の理論では G と G^* の入れ替えに関する対称性があるため，反対符号のツイスト

$$T \Longrightarrow T - \frac{1}{2}\partial J \tag{47}$$

を考えることも可能です．この場合には，G^* が共形次元 1 を持つため，積分 $\oint G^*(z)dz = G_0^*$ が BRS 作用素 Q と見なされます．

理論の正則成分と反正則成分に関して同じ符号のツイストをとるか，反対符号のツイストをとるかに応じて 2 つの理論，A モデルと B モデルが定義されます．すなわち，

$$\text{A モデル}：Q = G_0 + \bar{G}_0^*, \tag{48}$$

$$\text{B モデル}：Q = G_0 + \bar{G}_0. \tag{49}$$

この 2 つのモデルは互いに一種の双対の関係にあり，特に，位相的弦理論においてはミラー対称性と呼ばれる対称性で結ばれています．ミラー対称性を用いると，カラビ・ヤウ多様体（弦理論における 6 次元の内部空間）の中の有理曲線の数を数え上げることが可能となり，代数幾何学やシンプレクティック幾何学の分野に大きな影響を与えました．また，特定の非コンパクトなカラビ・ヤウ多様体の場合には，有理曲線の数え上げが，ゲージ理論のインスタントン振幅の足し上げに相当し，超対称ゲージ理論の厳密解を再現することができます．

4. 最後に

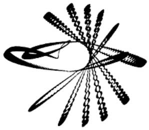
以上，駆け足で位相的場の理論の基礎を見てきました．エネルギーや運動量がゲージ自由度になるような一見不思議な理論ですが，種々の幾何学量や位相不変量を場の理論の言葉を用いて表現することを可能にします．今のところ応用は素粒子論に限られていますが，近い将来，物性論や量子計算の世界などに広まっていくものと思われます．2 年ほど前にカリフォルニア大学のサンタバーバラ分校の理論物理学研究所（KITP）に滞在していたとき，見かけない人物と昼食で一緒になりました．彼はマイクロソフトの研究者で当時 KITP の向かいに建設中だった Q-station のスタッフだということでした．専門は量子計算で topological quantum computation のために超弦理論のワークショップに潜り込んで位相的場の理論の情報を収集していると言っていました．これには当時大分驚きましたが，現在ではこうした研究はかなり大きな流れになってきているようです．将来の研究の進展が楽しみです．

参考文献

1) E. Witten, *Commun. Math. Phys.* **117** (1988) 353.
2) E. Witten, *Commun. Math. Phys.* **118** (1988) 411.
3) T. Eguchi and S.K. Yang, *Mod. Phys. Lett.* **A5** (1990) 1693.
4) E. Witten, *Essays on Mirror Manifolds*, International Press 1992.
5) N. Nekrasov, *Adv. Theor. Math. Phys.* **7** (2004) 831.
6) H. Ooguri, A. Strominger and C. Vafa, *Phys. Rev.* **D70** (2004) 106007.
7) 江口　徹，数理科学 1996 年 8 月号．別冊・数理科学「現代数理物理の展開」(2003 年 10 月）に再録．

（えぐち・とおる，京都大学基礎物理学研究所）

ボース・アインシュタイン凝縮と位相



上田 正仁

ボース・アインシュタイン凝縮 (Bose–Einstein condensation 以下，BEC と略す) は，様々な超流動や超伝導現象を引き起こすが，その際，位相が中心的な役割を果たす．BEC の位相は量子力学的であると同時に熱力学的変数として振舞い，循環や磁束の量子化を通じて系にトポロジカルな安定性をもたらす．本稿では，BEC の位相をミクロな立場からゲージ対称性をあからさまに破ることなく導入する方法について述べる．

1. はじめに

ボース・アインシュタイン凝縮 (BEC) の位相は通常は次のように導入される．系が BEC を起こすことは，ボース場あるいは偶数個のフェルミオン場の積からなる場の演算子がゼロでない複素数の期待値

$$\langle \hat{\Phi} \rangle = \Phi \neq 0 \tag{1}$$

をとることであると仮定する．これを

$$\Phi = |\Phi| e^{i\theta} \tag{2}$$

と絶対値と位相に分離したときの θ を BEC の位相と定義するのである．超流動速度は θ を用いて

$$\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} = \frac{\hbar}{m} \nabla \theta \tag{3}$$

と与えられる．ここで，$\hbar$ はプランク定数を 2π で割った量，m は原子の質量である．超流動速度を超流動中の閉曲線に沿って積分した量は循環と呼ばれるが，(3) 式と波動関数の一価性より

$$\oint \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} d\boldsymbol{r} = \frac{h}{m} n, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{4}$$

であることがわかる．したがって，循環は h/m を単位として量子化される．

超伝導は，電子 2 個からなるクーパー対が BEC を起こした状態であり，$\hat{\Phi}$ を電子対に対する場の演算子と置き換えることにより上記の議論はそのまま当てはまる．この場合，循環の量子化に対応して磁束が $h/2e$ を単位として量子化される．

(2) 式で定義された位相は各 BEC ごとにランダムだがある決まった値をとる．特に，熱力学的極限では 2 つの異なった位相 θ と $\theta + \theta_0$ はエネルギー的に縮退した同等な基底状態に対応しているとみなされる．これを，系は $U(1)$ ゲージ対称性を自発的に破っていると言う．この対称性の破れにともなって南部・ゴールドストーンモード (NG) が現れる[1]．このように，$U(1)$ ゲージ対称性を破って BEC の位相を導入する方法は，大変巧妙にできており，また，いろいろな物理量を計算する上で大変便利である．しかし，以下のような概念的な困難を伴う．

容器に閉じ込められた超流動ヘリウム 4 を考えよう．原子は日常のエネルギースケールでは生成したり消滅したりしないので原子数は確定しており，原子数が異なった状態の重ね合わせは禁止されている (超選択則)．したがって，場の演算子の期待値はゼロでなければならない．原子の場合，$U(1)$ ゲージ対称性は系に含まれる全原子数が保

存されることと等価であるので，(1) 式はそれをあからさまに破っている．同じことは，超伝導にも当てはまる．閉じた系の電荷は厳密に保存するので，クーパー対の異なる状態を重ね合わせることはできない．超伝導の BCS 状態は，クーパー対のコヒーレント状態であるが，これはゲージ対称性をあからさまに破っている．したがって，原子やクーパー対のコヒーレント状態を用いて定義される BEC の位相は近似的な概念である．しかし，BEC の位相は超流動や量子渦を生み出す基本的な量であるので，近似的にしか定義されないというのは不都合なことである．実は，BEC の位相は，ゲージ対称性を破らずに導入することができる．このことを示すために，まず，BEC の秩序パラメーターが $U(1)$ ゲージ対称性を破ることなく導入できることを示そう．

2. 非対角長距離秩序

BEC はマクロな数の粒子が 1 粒子状態に凝縮した状態である．これは数学的には 1 粒子密度演算子の固有値がマクロな値を持つことを意味する[2)]．N 粒子からなる系の状態が $|\Phi\rangle$ であるとき，1 粒子密度行列 $\rho_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ は

$$\rho_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \langle\Phi|\,\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\,\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}')|\Phi\rangle \tag{5}$$

で与えられる．ここで，$\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}')$ は位置 $\boldsymbol{r}'$ にある粒子を消滅させる場の演算子である．(5) 式の右辺は，$\boldsymbol{r}'$ で粒子を 1 個消滅させ，$\boldsymbol{r}$ に粒子を 1 個つけ加えても系が同じ状態 $|\Phi\rangle$ にとどまる確率振幅を表している．特に，$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}'$ なる対角成分は粒子数密度を与える．一般に，密度演算子が $\hat{\rho}$ で与えられる系の 1 粒子密度行列は次のように与えられる．

$$\begin{aligned}\rho_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') &= \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\,\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\,\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}')\}\\ &= \langle\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\,\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}')\rangle.\end{aligned} \tag{6}$$

ここで，$\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}\}$ を単に $\langle\hat{A}\rangle$ と書いた．

場の演算子を $\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}) = (1/\sqrt{V})\sum_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$ (V は系の体積) とフーリエ変換する．系が空間的に一様で熱平衡状態にある場合は $\langle\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{q}}\rangle = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}}\langle\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}\rangle \equiv \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}}\langle\hat{n}_{\boldsymbol{k}}\rangle$ が成立するので，

$$\begin{aligned}\rho_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') &= \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\langle\hat{n}_{\boldsymbol{k}}\rangle e^{-i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\\ &= \frac{\langle\hat{n}_0\rangle}{V} + \int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\langle\hat{n}_{\boldsymbol{k}}\rangle e^{-i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\end{aligned} \tag{7}$$

を得る．ここで最後の等式において，$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$ の成分を分離し，その他の成分は和を積分に置き換えた．右辺の積分は $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\to\infty$ の極限をとると因子 $e^{-i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}$ が激しく振動するためにゼロとなり（リーマン・ルベーグの定理），次の結果を得る．

$$\lim_{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\to\infty}\rho_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \frac{\langle\hat{n}_0\rangle}{V}. \tag{8}$$

粒子数密度 N/V を一定にしつつ N と V を無限大にするという熱力学的極限においても左辺がゼロとならないためには，$\langle\hat{n}_0\rangle$ が体積に比例して増大しなければならない．このとき，系は非対角的（すなわち，$\boldsymbol{r}\neq\boldsymbol{r}'$）な長距離秩序を持つと言う．逆もまた成立するので，BEC の存在は非対角長距離秩序 (off-diagonal long-range order, ODLRO)[3)] の存在と等価であることがわかる．ODLRO は，ルビジウム原子のボース・アインシュタイン凝縮を用いて観測された[4)]．

上記の議論から，ボース凝縮している系の粒子数密度 $\langle\hat{n}_0\rangle/V$ は，ある場所 $\boldsymbol{r}'$ で粒子を取り出しそれを遠方の場所 $\boldsymbol{r}$ に移動しても系が元と同じ量子状態にとどまる確率振幅そのものであることがわかる．粒子が系の状態を乱すことなく（$\boldsymbol{r}'$ から $\boldsymbol{r}$ へと）長距離を移動できることは，BEC と超流動性との密接な関係を示唆している．

比較のために，BEC の転移温度よりも十分高温での 1 粒子密度演算子の振舞いを調べてみよう．このとき，(7) 式の右辺の第 1 項はゼロ，第 2 項で $\langle\hat{n}_{\boldsymbol{k}}\rangle$ はマックスウェル・ボルツマン分布に従うので

$$\rho_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \frac{n}{8\pi^3}e^{-\frac{mk_BT}{2\hbar^2}|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^2} \tag{9}$$

が得られる（k_B はボルツマン定数）[5)]．これから高温極限 $T\to\infty$ では $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}'$ なる対角項のみが残ることがわかる．このように，密度行列の非対角項は系の量子的な性質を表している．以下で示

すように，BECの位相はまさにこの非対角項から生じる．

理想ボース気体の場合，全粒子数を N，最低1粒子準位にある粒子数を n_0 とすると，熱平衡状態でBECが存在するための条件は，「n_0 が N と同程度の大きさである」ことである．ここで，「同程度の大きさ」とは粒子数密度を一定としつつ粒子数と体積を無限大とする熱力学的極限をとった場合に，比 n_0/N がゼロにならないことを意味する．しかし，超流動ヘリウムのように粒子間相互作用が存在する場合は，1粒子エネルギー準位という概念は明確な意味を持たない．そこでペンローズとオンサーガーは，BECの概念を次のように拡張した[2)]．

N 粒子系の密度演算子 $\hat{\rho}$ を用いて1粒子還元密度演算子を次のように定義しよう．

$$\hat{\rho}_1 = N\mathrm{Tr}_{2,3,\cdots,N}\hat{\rho}. \tag{10}$$

ここで，$2,3,\cdots,N$ は1番目の粒子以外についてトレースを取るものと約束する．同種粒子系を仮定しているので，どの $N-1$ 個の粒子についてトレースをとっても同じ結果が得られる．$\hat{\rho}_1$ を対角化して得られる最大固有値を $n_{\max}^{(1)}$ とすると，BECが存在するための条件は，「$n_{\max}^{(1)}$ が N と同程度の大きさである」こと，すなわち，比 $n_{\max}^{(1)}/N$ が熱力学的極限でゼロとならないことである．空間的に一様な系では運動量がよい量子数であるから，この場合のBECの条件は巨視的な数の粒子が同じ運動量状態を占めることである．

3. BECの位相

N と同程度の最大固有値に対応する固有状態が1つしかないものと仮定してそれを $|\Psi\rangle$ と書くと，$\hat{\rho}_1$ は次のようにスペクトル分解できる．

$$\hat{\rho}_1 = n_{\max}^{(1)}|\Psi\rangle\langle\Psi| + \sum_{\nu} n_{\nu}^{(1)}|\nu\rangle\langle\nu|. \tag{11}$$

ここで，$n_{\max}^{(1)}$ 以外の固有値 $n_{\nu}^{(1)}$ は仮定により，1と同程度かそれ以下の大きさである．座標表示をとると，

$$\langle \boldsymbol{r}'|\hat{\rho}_1|\boldsymbol{r}\rangle = n_{\max}^{(1)}\langle \boldsymbol{r}'|\Psi\rangle\langle\Psi|\boldsymbol{r}\rangle + \sum_{\nu} n_{\nu}^{(1)}\langle \boldsymbol{r}'|\nu\rangle\langle\nu|\boldsymbol{r}\rangle. \tag{12}$$

波動関数は $1/\sqrt{V}$（V は系の体積）のオーダーなので熱力学的極限あるいは $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\to\infty$ なる極限をとると右辺の第1項以外の項はゼロとなる．したがって，$\Psi(\boldsymbol{r})$ を

$$\Psi(\boldsymbol{r}) \equiv \sqrt{n_{\max}^{(1)}}\langle \boldsymbol{r}|\Psi\rangle \tag{13}$$

と定義するとBECの条件は，$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\to\infty$ で

$$\langle \boldsymbol{r}'|\hat{\rho}_1|\boldsymbol{r}\rangle \to \Psi(\boldsymbol{r}')\Psi^*(\boldsymbol{r}) \neq 0 \tag{14}$$

となることと等価である．(14) 式が成立すると，$\Psi(\boldsymbol{r})$ は非常に良い近似で1粒子密度行列 $\rho_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ の固有関数になる．

$$\int d\boldsymbol{r}'\,\Psi(\boldsymbol{r}')\rho_1(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}) \simeq n_{\max}^{(1)}\Psi(\boldsymbol{r}), \quad n_{\max}^{(1)} = \int d\boldsymbol{r}|\Psi(\boldsymbol{r})|^2. \tag{15}$$

$\Psi(\boldsymbol{r})$ は，秩序パラメーター，あるいは，凝縮体の波動関数と呼ばれ，その空間積分 $\int|\Psi(\boldsymbol{r})|^2 d\boldsymbol{r} = n_{\max}^{(1)}$ は凝縮体に含まれる粒子数である．このとき，N と同程度の巨視的な数の原子が Ψ で記述される量子状態を占めて完全に同じように振舞う結果，ミクロな量子効果がマクロなスケールへと増幅される．以上の議論は粒子数を N に固定して得られたので，ゲージ対称性は明らかに保たれている．そのようにして得られた秩序パラメーター $\Psi(\boldsymbol{r})$ を振幅と位相に分解

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = |\Psi(\boldsymbol{r})|e^{i\theta(\boldsymbol{r})} \tag{16}$$

して得られる $\theta(\boldsymbol{r})$ をBECの位相であると定義することができる．特に，位相の原点は全く任意で，超流動速度 (3) や干渉効果に現れる相関関数 (14) はグローバルなゲージ変換 $\theta(\boldsymbol{r})\to\theta(\boldsymbol{r})+\theta_0$ に対して不変であることがわかる（θ_0 は任意の定数）．

固体における結晶の周期構造も長距離秩序の一例であるが，これは，粒子数密度に関する対角的（$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}'$）な長距離秩序である．これに対して，ODLROは，密度だけでなく位相にも依存してお

り，この位相の空間変化が超流動や超伝導を引き起こす．また，(7) 式とそれに続く議論からわかるように，巨視的な波動関数 Ψ は BEC が存在する場合にのみ生じる熱力学的変数である（Ψ が熱力学的極限でも消えないことは BEC と等価であることを思い出そう）．したがって，BEC の位相は量子力学的変数であると同時に熱力学的変数として振舞う．

4. フェルミ粒子系の場合

フェルミ粒子系の場合は，パウリの排他律により ρ_1 の最大固有値は 1 以下であり，したがって，理想フェルミ気体は ODLRO を示さず BEC は起きない．フェルミ粒子系が ODLRO を示すためには，最低 2 個のフェルミ粒子が対を作りそれがボース凝縮を起こす必要がある．これを見るために，2 粒子の還元密度演算子

$$\hat{\rho}_2 = N\mathrm{Tr}_{3,4,\cdots,N}\hat{\rho} \tag{17}$$

を考え，それを対角化して得られる固有値の最大値 $n_{\max}^{(2)}$ を考えよう．このとき，一般に，$n_{\max}^{(2)} \leq N$ であることが示される[3]．今，2 粒子の還元密度演算子が N と同じ程度の大きさの固有値 $n_{\max}^{(2)}$ を持つ場合を考え，それに対応する固有状態を $|\phi_{\mathrm{pair}}\rangle$ と書こう．このとき，$\hat{\rho}_2$ は次のようにスペクトル分解される．

$$\hat{\rho}_2 = n_{\max}^{(2)}|\phi_{\mathrm{pair}}\rangle\langle\phi_{\mathrm{pair}}| + \sum_{\mu} n_{\mu}^{(2)}|\mu\rangle\langle\mu|. \tag{18}$$

両辺の座標表示を取り，$\Phi(\boldsymbol{r}_1', \boldsymbol{r}_2') = \sqrt{n_{\max}^{(2)}}\langle\boldsymbol{r}_1', \boldsymbol{r}_2'|\phi_{\mathrm{pair}}\rangle$ 等とおくと

$$\begin{aligned}&\langle\boldsymbol{r}_1', \boldsymbol{r}_2'|\hat{\rho}_2|\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2\rangle\\&= \Phi(\boldsymbol{r}_1', \boldsymbol{r}_2')\Phi^*(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\\&\quad + \sum_{\mu} n_{\mu}^{(2)}\langle\boldsymbol{r}_1', \boldsymbol{r}_2'|\mu\rangle\langle\mu|\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2\rangle.\end{aligned} \tag{19}$$

ボース粒子の場合と同様の議論により，$|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_1'| \to \infty$ とすると右辺の第 2 項は消えるが，第 1 項は $\boldsymbol{r}_1 \simeq \boldsymbol{r}_1'$ かつ $\boldsymbol{r}_2 \simeq \boldsymbol{r}_2'$ であれば残る．$\langle\boldsymbol{r}_1', \boldsymbol{r}_2'|\phi_{\mathrm{pair}}\rangle$ は，$1/\sqrt{V}$（V は系の体積）に比例するので，$n_{\max}^{(2)}$ が N と同程度であれば，熱力学的極限をとっても (19) 式の右辺の第 1 項は残る．このときフェルミ粒子系は 2 粒子の ODLRO をもち，$\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ は秩序パラメーター，またはクーパー対の波動関数とみなすことができる．フェルミ超流動や超伝導における位相を (16) 式と同様に $\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ の位相として定義することで $U(1)$ ゲージ対称性を破らずに導入することができる．

5. おわりに

超伝導や超流動の本質は，$U(1)$ ゲージ対称性の破れであるという主張がしばしばなされる．しかし，ゲージ対称性は最も基本的な法則なので，それが破れると初めて聞いたときには誰しも驚くのではないだろうか．ゲージ対称性の破れは平均場近似した結果現れる見かけ上のものに過ぎないのであるが，一方で，BEC の位相が平均場近似の枠内でしか導入されないのだとしたら，循環の量子化や量子渦のような超流動の最も基本的な現象も同じレベルの近似的な現象ということになってしまう．

本稿で述べたように，BEC の位相はゲージ対称性を破ることなく導入できる．還元密度演算子の固有値の分布を見ることにより BEC の存在の有無が判定でき，全粒子数 N と同じオーダーの固有値の固有関数を秩序パラメーターとみなすことによって，BEC の位相は自然に導入される．更に，N と同じオーダーの最大固有値が現れる最も次数の低い密度演算子が何かを見ることで，凝縮体を構成する最小ユニットが何であるかが理解できる．量子情報の言葉で言うと，その最小のユニットは，エンタングルした最小のユニットということになる．超流動ヘリウム 4 の場合は 1 粒子が最小のユニット，超伝導や超流動ヘリウム 3 の場合は，2 粒子が最小のユニットになっている．2 粒子密度演算子の固有値が全粒子数 N と同じオーダーになることは，3 次元超伝導や超流動ヘリウム 3 がクーパー対がボース・アインシュタイン凝縮を起

こした状態であることを示している[6]．理想フェルミ気体は最もエンタングルした状態であり，最小ユニットは全粒子数 N である．

このような一般的な枠組みから超流動現象を眺めると，新たな可能性も見えてくる．例えば，N と同じオーダーの固有値が2個以上存在する場合は，循環の量子化が破れたり[7]，スピンのように内部自由度をもったBECの場合には，平均場近似の結果が定性的にも正しくなくなる場合が存在する[8]．また，スピンが2以上の原子がBECを起こすと，その最小のユニットが3という場合が存在する．このとき，原子が3個でスピンシングレットを組んだトリオ状態に系は凝縮する[9]．

本稿では，BECの位相というキーワードを中心として，超流動や超伝導が還元密度演算子のマクロな固有値の分布とそれに対応する固有関数を見ることによって統一的に理解できることを紹介した．近年，レーザー冷却法によりBECを示す新しい原子種が次々と実現されているが，これらの研究を通じて超流動の概念が拡張され一段と深化するものと期待される．

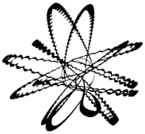
本記事を通読いただき貴重なコメントをいただいた小嶋泉先生に心から感謝致します．

参考文献

1) Y. Nambu, *Phys. Rev.* **117**, 648 (1960).
2) O. Penrose and L. Onsager, *Phys. Rev.* **104**, 576 (1956).
3) C.N. Yang, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 694 (1962).
4) I. Bloch, T. Hänsch, T. Esslinger, *Nature* **403**, 166 (2000).
5) 上田正仁,『現代量子物理学—基礎と応用—』(培風館, 2004).
6) 超伝導の BCS 状態はクーパー対の BEC とみなすことはできないという記述がしばしば見られる（例えば，R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, Benjamin）が，これは本稿の議論から明らかなように正しくない．
7) M. Ueda and A.J. Leggett, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1489 (1999).
8) E.J. Mueller, T.-L. Ho, M. Ueda, and G. Baym, *Phys. Rev. A* **74**, 033612 (2006).
9) M. Ueda and M. Koashi, *Phys. Rev. A* **65**, 063602 (2002).

（うえだ・まさひと，東京工業大学大学院理工学研究科）

トポロジカル秩序



押川　正毅

1. 量子相転移と秩序

物質の状態を分類する上では，相の概念が重要である．相は様々な秩序によって特徴付けられ，その秩序を検出する物理量が秩序パラメータである．典型的な例として，強磁性体を極めて簡単化したモデルである格子上のイジング模型が良く議論される．これは

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle j,k \rangle} \sigma_j^z \sigma_k^z, \tag{1}$$

というハミルトニアンで定義される．ただし，σ^z はパウリ行列の z 成分である．格子としては，例えば2次元正方格子や3次元立方格子を考える．ここで，j, k は格子点のラベルであり，和はすべての最近接格子点の対について取る．高温では各スピンの向きが乱雑であり，全体として磁化を持たない常磁性相である．しかし，温度を下げていくと，ある温度（キュリー温度）以下でスピンの向きが全体として揃い，マクロな磁化を持つ強磁性相になる．

イジング模型のハミルトニアンは，スピンの上下の反転に対して対称である．常磁性相では，磁化も特定の方向を向かず，状態もスピンの上下反転に関して対称である．しかし，強磁性相では，磁化は上または下の特定の方向を向く．すなわち，強磁性相では対称性の自発的破れが起きる．

このように，秩序パラメータや対称性の自発的破れは，相を分類する上での基本概念である．上では，有限温度の古典統計力学系における，熱ゆらぎによって引き起こされる相転移の例を議論した．一方で，熱ゆらぎの存在しない絶対零度においても，量子力学系においては量子ゆらぎが存在する．ハミルトニアンに含まれるパラメータを変化させることによって量子ゆらぎの強さが変化し，絶対零度でも相転移が生じることがある．これを量子相転移と呼ぶ．量子相転移においても，古典統計力学系と同様に，秩序パラメータや対称性の自発的破れが基本概念となる．典型的な例として，横磁場イジング模型を考える．この模型のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle j,k \rangle} \sigma_j^z \sigma_k^z - \Gamma \sum_j \sigma_j^x \tag{2}$$

で与えられる．以下，$J \geq 0, \Gamma \geq 0$ とする．第1項は，古典イジング模型と全く同じである．一方，第2項はパウリ行列の x 成分を含み，これは第1項と非可換である．この非可換性により，ハミルトニアンの固有状態は自明でないものとなる．第2項は，スピン間の相互作用の軸（z 軸）と垂直な x 方向にかけた磁場を表すので，これを横磁場イジング模型と呼ぶ．

第2項が実際に量子ゆらぎを与えることは，次のようにして見ることができる．横磁場がないとき（$\Gamma = 0$），この模型は古典イジング模型となり，基底状態はスピンがすべて上向き $|\uparrow\rangle$ または

下向き $|\downarrow\rangle$ に揃った完全強磁性の状態で与えられる．これらの状態は，各サイトでの σ^z の固有ベクトルである．ここに第2項（横磁場）が作用すると，$\sigma^x|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle, \sigma^x|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$ となり，スピンを「ひっくり返す」働きをする．そのため，横磁場の存在する場合には，基底状態においてもスピンが完全に揃わず，乱れが生じる．これは第2項がもたらす量子ゆらぎの効果と見なすことができる．

特に，横磁場が強い極限 $\Gamma/J \to \infty$ では，基底状態はすべてのスピンが σ^x の固有状態

$$|x+\rangle \equiv \frac{|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \tag{3}$$

となる状態で与えられる．この状態では，どのサイトにおいても，スピンの z 成分を観測したとき上向きになる確率と下向きになる確率はそれぞれ1/2である．また，この状態では任意の2つの σ^z の相関関数はゼロになる．したがって，この状態は，(スピンの z 成分は) 完全に乱れた状態である．

ただし，この状態は，横磁場によってすべてのスピンが x 方向に揃ったものとも言える．そうすると，この状態でも秩序があると考えるべきだろうか？ この問に対する答えは実はそんなに簡単ではないが，例えば以下のように2つの極限を区別することができる．$\Gamma = 0$ のときは，すべてのスピンが上向きに揃った状態と下向きに揃った状態の2つの基底状態が存在する．一方，$\Gamma/J \to \infty$ のときは，基底状態はスピンが $+x$ 方向に揃った状態1つのみであり，逆向き（$-x$ 方向）に揃った状態は基底状態ではない．すなわち，$\Gamma = 0$ では対称性の自発的破れが起きているが，$\Gamma/J \to \infty$ では起きていない．この意味で，前者には秩序があり，後者にはないと考えることができる．

さて，Γ/J を0と ∞ の間で変化させるとどうなるだろうか．秩序の有無は対称性の自発的破れの有無によって明確に区別できる．特に，絶対零度の量子系では基底状態の個数によって対称性の自発的破れの有無は明確に判定できるだろう．（ただし，基底状態の個数を数えることは，原理的にも実際的にも実は意外と難しい問題を含む．本記事では紙数の関係で詳しい議論は省略する．）

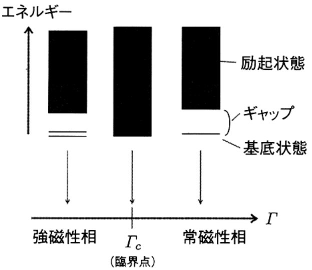


図1　横磁場イジング模型の相図．$\Gamma < \Gamma_c$ は強磁性相であり，2つの基底状態が縮退しその上に有限のギャップがある．$\Gamma > \Gamma_c$ は常磁性相であり，唯一の基底状態の上に有限のギャップがある．臨界点 $\Gamma = \Gamma_c$ では，基底状態のすぐ上から連続的に励起状態が分布し，ギャップはゼロである．

この模型では，$\Gamma < \Gamma_c$ では基底状態が二重に縮退しており，$\Gamma > \Gamma_c$ では基底状態はただ1つである．この（1つまたは2つの）基底状態と，その上の励起状態の間には，$\Gamma \neq \Gamma_c$ では有限の励起エネルギーギャップが存在する．一方，$\Gamma = \Gamma_c$ では，（無限に大きい系では）基底状態の上に連続的に励起状態が存在する．すなわち，励起エネルギーギャップはゼロである．したがって，Γ を変化させたとき，ある Γ_c を境に，自発的に対称性の破れた秩序相（強磁性相）と，破れていない無秩序相（常磁性相）が明確に区別できることになる．ここで，$\Gamma = \Gamma_c$ が量子相転移点に他ならない．この系の相図を，エネルギースペクトルの変化とともに図1に示す．

この相図は，Γ を温度 T と読みかえれば，古典イジング模型の有限温度における相図と全く同じである．この一致は偶然ではない．実は d 次元横磁場イジング模型は $d+1$ 次元の有限温度古典イジング模型（のある異方的な極限）と等価なのである[1]．

2. 秩序とは何か？——再考——

前節で導入した強磁性的なイジング模型の場合には，秩序パラメータは z 方向の磁化 σ^z であった．これは，模型自体が z 方向の磁化を揃えようとする相互作用を含んでおり，$\Gamma=0$ の極限では強磁性状態が基底状態になるのが自明であるため，自然に決定される．

しかし，近年興味を持たれている系の多くにはフラストレーションが存在する．フラストレーションとは，局所的な相互作用によるエネルギーの最小化が互いに背反し，すべての相互作用によるエネルギーを同時に最小化することができないことを意味する．例えば，三角格子上の反強磁性イジング模型を考えよう．それぞれの相互作用によるエネルギーを最小化するには隣接するスピンの向きを逆にする必要があるが，三角格子上ではすべての隣接するスピンの向きを逆にすることは不可能である．

このような場合，どのような秩序が生じるかがそもそも明らかでない．逆に言えばフラストレーションから様々な興味深い物理が生み出される．もちろん個々の系についての具体的な議論が必要となるが，一般論として，多体系における「秩序」とは何だろうか？

一つの作業仮説として，「秩序とは対称性の自発的破れである」ということが考えられる．対称性の自発的破れがあれば，秩序があると言っても良いだろう．（ただし，後で議論するように，逆は必ずしも真ではない．）さて，未知の系を扱う場合に，秩序パラメータが何であるかもわからないとすれば，どのように対称性の自発的破れを検出すれば良いだろうか？ 秩序パラメータには原理的に無限の可能性があるので，一般的に対称性の自発的破れを同定するのは不可能に思える．しかし，量子多体系には，秩序パラメータに関する知識がなくても対称性の自発的破れを示唆する手がかりが存在する．第1節で述べた基底状態の縮退がそれである．強磁性イジング模型の場合は秩序パラメータは明らかだったが，仮に秩序パラメータを知らなかったとしても基底状態の縮退は検出できる．対称性の自発的破れがある場合，定義により縮退した基底状態があることになる．したがって，基底状態の縮退は，複雑で秩序パラメータが自明でない系についても対称性の自発的破れの兆候として有用である[2]．

3. 基底状態のトポロジカル縮退

前節で議論したように，対称性の自発的破れがある場合は縮退した基底状態が生じる．では，量子多体系に基底状態の縮退があるとき，これは必ず対称性の自発的破れを意味するだろうか．以下に述べるように，この問いに対する答えは（少なくとも，通常の意味の対称性に関しては）否である．

ある種の量子多体系には，トポロジカル縮退と呼ばれる，基底状態の奇妙な縮退が生じる．これが最初に認識されたのは，分数量子ホール状態においてであった．例えば，代表的な分数量子ホール状態である，フィリングフラクション $\nu=1/3$ におけるラフリン状態を考える[3]．

この状態を球面上で定義すると，ラフリン状態は1つしかない．しかし，トーラス上（周期的境界条件を課した平行四辺形と考えてもよい）では，ラフリン状態は三重に縮退することが見出された．一般に，向き付け可能な2次元多様体は，非負の整数である種数 g によって位相幾何学的に区別される．種数は，直観的には，2次元多様体を3次元空間に埋め込んだときの「穴の数」に対応する．例えば球面は $g=0$，トーラスは穴が1つなので $g=1$ となる．穴の数を増やせば，いくらでも大きな g を持つ多様体も作ることができる．種数 g を持つ2次元多様体上では，$\nu=1/3$ のラフリン状態は 3^g 重に縮退することがわかった[4]．

このような，系の存在する空間のトポロジーに依存した基底状態の縮退を，トポロジカル縮退と呼ぶ．最近では，分数量子ホール状態以外にも，トポロジカル縮退を持つ系の例が見つかっている．代表的なものとして，量子ダイマー模型におけるResonating–Valence–Bond (RVB) 液体などが挙

げられる[5]．また，トポロジカル縮退は，量子計算に用いるための安定なキュービットの実現との関連でも興味が持たれている[6]．

トポロジカル縮退は，通常の意味での対称性の自発的破れに伴うものとは考え難い．対称性の自発的破れに伴う対称性の破れであれば，空間のトポロジーとは独立に，対称性の破れのパターンで縮退度が決まるはずである．例えば，強磁性イジング模型の場合，球面上でもトーラス上でも，スピンが上向きと下向きに揃った状態に対応して，縮退度は2である．ラフリン状態の縮退度のようなトポロジカル縮退は，それとは本質的に異なっている．

4. トポロジカル秩序

前述のように，トポロジカル縮退は，通常の秩序（対称性の自発的破れ）では理解できない．そこで，秩序の概念を拡張し，「トポロジカル秩序」という考え方を導入する．横磁場イジング模型の秩序相は強磁性秩序（対称性の自発的破れ）を持ち，その反映として基底状態に二重縮退が生じる．それと同様に，ラフリン状態はトポロジカル秩序を持ち，その反映として基底状態にトポロジカル縮退が生じると考えるのである．

しかし，秩序の実体が何もないので，単なる言葉遊びとも感じるかもしれない．これは全く正当な疑問であるが，「トポロジカル秩序」という概念を導入することによって，多くの現象を統一的に理解することができるのである．

まず，ある模型に，トポロジカル縮退が存在する相と，しない相が存在したとする．（あるいは，異なるトポロジカル縮退を持つ2つの相を考えても良い．）両者は普通の意味での秩序を持たず，区別がつかないようにも思われる．しかし，基底状態の縮退度が異なるので，2つの相の間を連続的に繋げることはできない．実際に2つの相の間を繋げるようにハミルトニアンを変化させると，量子相転移が存在する．通常の秩序の概念では，この量子相転移が存在しなくてはならない理由が記述できない．

しかし，一方の相にはトポロジカル秩序が存在し，他方の相にはトポロジカル秩序が存在しない（あるいは異なる種類のトポロジカル秩序がある）と考えれば，この2つの相が区別でき，その間に量子相転移がなくてはならないことが自然に理解できる．さらに以下のように，トポロジカル秩序は量子相転移の存在以外に関しても適用できる概念である．

系を構成する基本粒子（物性物理の問題では多くの場合，電子がこれにあたる）が相互作用するとき，基本粒子は自由に運動することができない．そのため，系の性質を基本粒子の運動を基に記述することは難しい．しかし，このような相互作用する多体系の低エネルギー状態が，「準粒子」と呼ばれる，ほぼ自由な粒子のように振る舞う励起の集まりとして記述できる場合がしばしばある．準粒子は基本粒子とは異なり，一般に基本粒子の集団運動を記述するものである．

通常の金属（フェルミ流体）では，準粒子は電子と質量は異なるものの，電荷は電子のものと等しい．一方，ラフリン状態などの分数量子ホール状態では，準粒子の電荷が，元の電子の電荷の分数倍（例えば1/3倍）となる．このような現象を分数化と呼ぶ．一見，電子を小さく分割したかのようにも思われるが，この場合はもちろんそうではない．電子は，現在人類が到達し得る限りのエネルギーにおいて，内部構造のない点粒子として振る舞い，分割することはできない．分数量子ホール状態における分数化は，多電子系の集団運動の示す，驚くべき性質である．

ところで，理論的には分数量子ホール状態を球面やトーラスなどの閉じた2次元面上で考えることが多いが，実験は例えば長方形などの，端のある2次元系で行うことがほとんどである．分数量子ホール状態は，系の内部では有限の励起ギャップを持つが，端においては，ギャップがゼロの連続的な低エネルギー励起状態が出現する．これが分数量子ホール状態における端状態である．

このように分数量子ホール状態は，基底状態の

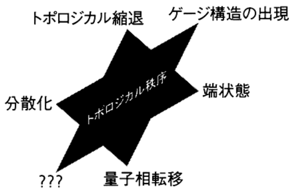


図 2　トポロジカル秩序の概念図．様々な奇妙な性質や現象を統一的に理解するため，背後にトポロジカル秩序の存在を考える．

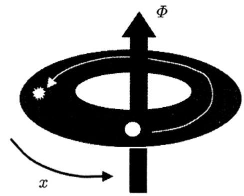


図 3　トーラス上での $\mathcal{F}_x, \mathcal{T}_x$ の導入．$\mathcal{F}_x$ は，トーラスの穴を貫く磁束 Φ を断熱的にゼロから磁束量子 Φ_0 まで増加させる．$\mathcal{T}_x$ は，準粒子・準正孔を対生成し，準粒子を穴の周りで一周させてから準正孔と対消滅させる．

トポロジカル縮退，分数化，端状態の存在，などの様々な奇妙な性質を持つ．これらは，一見，全く別の特徴のように見えるが，実は密接な関連があると考えられるようになった．分数量子ホール状態以外の系でも，これらの性質はしばしば相伴って現れるのである．すると，これらの性質をそれぞれバラバラに考えるのではなく，図 2 のように，トポロジカル秩序の帰結として理解するほうが自然であろう．

トポロジカル秩序は，それ自体「目に見える」ものではなく一種の仮想的な概念とも言えるが，上のように，様々な興味深い物理を統一的に理解する上で有用だと考えられる．現在のところ我々が（少なくとも筆者は）トポロジカル秩序についてまだ真の理解に到達していないために，仮想的な概念としてしか捉えられないだけなのかもしれない．これを筆者は，素粒子分野の人には超弦理論における M 理論[7] とのアナロジーで説明している．M 理論は明確な定義から出発したものではなく，様々な一見異なる超弦理論の間に密接な関係が見出されたことから，これらの背後に存在する仮想的な統一理論として導入されたものである．もちろん内容は全く異なるが，考え方には共通するものがあるかもしれない．（図 2 は，実は M 理論の有名な概念図を借用したものである．）

5. 分数化とトポロジカル秩序

前節では，トポロジカル秩序という概念を導入する根拠として，様々な奇妙な性質の間の密接な関連を挙げた．ただし，そのような関連は，この段階ではいくつかの例に基づく一種の予想とでも言うべきものである．トポロジカル秩序についての深い理解を得るためにも，一見全く異なる諸性質間の関連を一般的に明らかにすることが望まれる．

そのような方向での試みとして，最近，筆者らはいくつかの仮定の下で，分数化を示す系は一般にトポロジカル縮退を示すことを導いた[8]．基本的なアイデアを以下に説明する．

電荷 e を持つ電子が相互作用している系を考える．この系の基底状態の上には，励起状態までの間に有限のギャップがあるとする．ただし，基底状態が複数ある可能性は考慮する．また，この系は電荷 $e^* = (p/q)e$ の準粒子と，その「反粒子」に対応する，電荷 $-e^*$ の準正孔を持つとする．ここで，p, q は互いに素な整数とする．

例えば，この系がトーラス上にある場合を考える．ここで，次の 2 つの操作を導入する（図 3）．

$\mathcal{F}_x$: トーラスの「穴」を貫く磁束 Φ を断熱的にゼロから磁束量子 Φ_0 まで増やす．

$\mathcal{T}_x$: 準粒子・準正孔を対生成し，できた準粒子をトーラスの「穴」の周りを一周させてから準正孔と対消滅させる．

$\mathcal{F}_x$ を作用させて穴を貫く磁束が 1 磁束量子に達すると，磁束はトーラス上の電子状態には何の影響も及ぼさない．そのため，このときの系の基底

状態は，磁束を加える前の系の基底状態と全く同じはずである．したがって，基底状態から出発して $\mathcal{F}_x$ を作用させると，ギャップが磁束によって潰れないと仮定すれば再び基底状態に戻ることになる．ただし，基底状態が複数あるときは，元の基底状態とは異なる基底状態になる可能性がある．後で見るように，このことが鍵となる．

$\mathcal{T}_x$ も，基底状態に作用させるといったん準粒子と準正孔を対生成して励起状態になるが，最終的には対消滅させるため，結局は基底状態を与えるはずである．

さて，$\mathcal{T}_x$ と $\mathcal{F}_x$ を基底状態に順に作用させるとどうなるだろうか．$\mathcal{T}_x$ も $\mathcal{F}_x$ も基底状態を基底状態に移すので，2 つを順に作用させても当然基底状態になる．これだけでは何も面白くないようだが，2 つを作用する順番を入れ換えるとどうなるだろうか．

$\mathcal{F}_x$ を先に作用させると，トーラスの穴に磁束量子が入った状態で，その周りを準粒子が一周することになる．もし一周するのが電子であれば，アハロノフ・ボーム（AB）効果[9] により獲得する位相は 2π であり，ゼロと等価なので磁束の効果はない．しかし，$\mathcal{T}_x$ で一周させるのは電子ではなく，分数電荷 $e^* = (p/q)e$ を持つ準粒子である．そのため，この準粒子は非自明な AB 位相 $2\pi p/q$ を獲得することになる．一方，$\mathcal{T}_x$ を先に $\mathcal{F}_x$ を後に作用させると，磁束のない状態で準粒子が一周するのでこの AB 位相は生じない．そのため，基底状態の上での作用を式で表せば

$$\mathcal{T}_x \mathcal{F}_x \sim \mathcal{F}_x \mathcal{T}_x e^{2\pi i p/q} \qquad (4)$$

となる．すなわち，$\mathcal{T}_x$ と $\mathcal{F}_x$ は可換ではない．

基底状態が 1 つしかないとすれば，上式とは直ちに矛盾してしまう．したがって，トーラス上では必然的に複数の基底状態が縮退していることになる．別の言い方をすれば，基底状態に $\mathcal{F}_x$ を作用させたとき，元の基底状態ではなく別の基底状態に移るために，準粒子に対して異なる効果を与えるのである．さらに，以上の議論を一般化すると，準粒子が分数電荷 $e^* = (p/q)e$ を持つとき，種数 g の 2 次元面上では基底状態が q^g 重に縮退することが導かれる．これはトポロジカル縮退に他ならない．したがって，一見全く別の現象であるかに見える分数化とトポロジカル縮退が深く関連していることが明らかになった．また，本記事では省略するが，トポロジカル縮退は準粒子の量子統計とも密接に関連している．

6. おわりに

トポロジカル秩序についての最近の発展は，統計力学において「秩序」とは何かと言う基本的な問いを再び提起しているように思われる．物性物理学における様々な興味深い現象の探求が，このような基礎的な問題にも新たな知見を与えることを期待したい．

本記事のベースとなった研究の共同研究者である T. Senthil，古川俊輔，Grégoire Misguich 各氏を初め，有益な議論を頂いた皆さんに感謝する．

参考文献

1) レビューとして，例えば J.B. Kogut, *Rev. Mod. Phys.* **51**, 659 (1979) を挙げておく．
2) S. Furukawa, G. Misguich, and M. Oshikawa, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 047211 (2006).
3) 量子ホール効果については，吉岡大二郎『量子ホール効果』（岩波書店，新物理学選書，1998）等を参照されたい．
4) X.G. Wen and Q. Niu, *Phys. Rev. B* **41**, 9377 (1990).
5) R. Moessner and S.L. Sondhi, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1881 (2001).
6) A. Yu. Kitaev, *Ann. Phys.* **303**, 2 (2003). (arXiv: quant-ph/9707021)
7) 数理科学，特集「M 理論とは何か」2002 年 4 月号，No.**466**.
8) M. Oshikawa and T. Senthil, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 060601 (2006).
9) Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959).

（おしかわ・まさき，東京大学物性研究所）

書評



例題形式で学ぶ
現代素粒子物理学

川村嘉春著，B5 判，232 頁，本体 1886 円，サイエンス社

私がこの本の書評を書く気になったのは，「はじめに」の中に興味深い文章を見つけたからに他ならない．「難問と思われていた当時に自分を置いてみる．その時代背景の下で自分だったら，いかに挑んだか想像してみる．主役になったつもりでイメージしてみる．どれくらい少ない情報量の下で解くことができるかどうかあれこれ試してみる.」従来の多くの教科書の主な目標は，知識を伝えることである．素粒子論という分野は，その知識だけでも好奇心を十分満足させるものがあるのは間違いない．が，この本の著者は，それだけでは満足せず，知識に加えて，素粒子物理学を研究する上での指針みたいなものを提供することをも視野に入れているように思える．つまり，過去の素粒子論研究者が新理論の発見の際に用いた考え方を失敗したものも含めて紹介し，将来の素粒子論研究者に教訓として伝えよう，という大きな目標を見据えて，この本は書かれているようである．

この目標がいかに欲張りなものであるかは，後ほど説明するとして，この本の概要を述べる．主な対象は，素粒子物理学に興味・関心を持っている学部上級生及び大学院生であり，必要な予備知識は，特殊相対性理論，量子力学，場の量子論，群論の基礎としている．素粒子物理学，場の理論の簡単な紹介から始まって，弱い力，強い力，電磁力等の様々な力が，試行錯誤の末，ゲージ理論で記述できること，また，多くのハドロンがクォークを導入することでいかにシンプルに理解できるか等，標準模型に至る道をパリティや CP の破れ，ニュートリノ，自発的な対称性の破れ等重要なトピックを交えながら進めていく．特徴的なことは，テーマ毎に章が区切られていて，それぞれのテーマがいかに発展したか，ということを提示された問題を順々に解くような形で理解していく形式（演習形式と筆者は呼んでいるが）になっており，その発展のために重要だった事柄，考え方を教訓として各章の最後にまとめていることである．対称性に関する教訓は，何度も現れ，対称性が重要な概念であることがわかるが，一方で，その時代の常識を疑うことの重要性も何度か現れる．また，読み進めるうちに，湯川・朝永の仕事から始まり，クォークやレプトンの混合行列，ニュートリノ，坂田模型等，いかに多くの日本人が素粒子物理学の様々な分野で重要な貢献をしてきたかが，自然にわかるようになっている．これらのことは，素粒子物理学研究者を志す読者の興味を引きつけ，また，勇気づけるに違いない．

誤解や批判を恐れずにあえて素粒子物理学という学問の特徴を述べると，絶対的な拠り所となる原理がないところであろうか．物性や化学だと，少なくとも，量子力学まで戻れば，多体系であることからくる困難はあるにせよ，出発点としては間違っていないだろうと思えるが，素粒子物理学研究においては，新しい理論において，何が正しくて，何が偏見か，ということに対する絶対的な基準がない．そのためであろうか，当時は主流と思われていた考え方が結局正しくなかったということも，度々，起こっている．「当時に自分をおいてみる」，つまり，当時の人々が持っていた常識に起因する偏見や思い込みをわかりやすく，限られたページ数で説明することの困難さは想像に難くない．この本では，そこまで欲張りなことをやるのはなく，何がキーになっている要素かは，読者に提示し，そこから，真実への論理を読者に見つけてもらう，という演習が主になっている．

正直なところ，初学者に対して，これだけの説明で理解できるのであろうか，と思うような箇所も散見されるのは残念なところではあるが，これだけの内容をこのボリュームで説明しようと思えば，ある程度は仕方のないことであろう．大学や大学院の講義の教科書，ゼミでのテキストなどとして用いるには問題ないし，手軽に，素粒子論の醍醐味に触れることができる，という意味で，推薦できる書となっている．

最後にこの本でまとめた教訓の一つ「迷信を疑え．偏見に囚われるな．正面から立ち向かえ！」を紹介する．過去にいかにうまく働いた考え方でも，新理論を探す上では逆に障害になり得る，という意味であろう．何が信頼できる考え方で，何が偏見か，ということを見極めることが難しいのであるが，その意味では，この本でまとめた教訓も幾つかは将来迷信になってしまうかもしれない．そこが素粒子物理学の怖いところであり，面白いところでもある．

前川　展祐（名古屋大学大学院理学研究科）

相対論的重力と力学系

前田 恵一

19 世紀末のポアンカレによる三体問題研究[1]以後，自然界には系の非線形性によりカオスと呼ばれる複雑な現象が普遍的に現れることがわかってきた．20 世紀のコンピュータの発達とともに，その複雑な現象は，単に「乱雑」というのではなく，非線形現象の本質的な性質を表している．

一般相対性理論は非常に複雑な非線形偏微分方程式（アインシュタイン方程式）で記述されるため，新しいタイプの非線形現象が現れる可能性も存在するであろう．ここでは一般相対性理論における力学系について軽く触れたあと，強重力場中の粒子運動に現れるカオス現象について紹介しよう．

1 重力多体系と一般相対性理論

初めにニュートン力学系における重力多体系について少し述べる．重力相互作用のみ働く N 個の質点からなる力学系を重力多体系と呼ぶ．三体問題や惑星系などの N が小さい系を議論する場合は特に天体力学と呼ばれる．当然，系は非可積分で強いカオスが発生する．それに対し N が非常に大きい系（球状星団や銀河系などの天体集団）では天体の個々の運動ではなく，系全体の統計的な性質が重要となる．

これらの系を解析するには，通常 N 個の質点に対するニュートンの運動方程式を数値的に解き，その解を系統的に調べる．重力多体系と他の多体系の大きな違いは，重力多体系には熱平衡状態が存在しないという点にある．これは重力が距離の逆二乗に比例する長距離力で，お互いに近づけば近づくほど系はエネルギーを得し，重力熱力学的カタストロフィーを起こすからである[2]．

この重力多体系に関してはまだすべてが完全にわかっておらず，多くの興味深いトピックス（負の比熱や構造相転移など）があるが，ここでは一般相対性理論を基礎にした重力系について考えることにしよう．

一般相対性理論における多体問題には原理的な問題が存在する．例えば，ニュートン力学では二体問題は一体問題に帰着でき，簡単に積分できる．ところが一般相対性理論では二体問題ですら簡単に解けない．それは二体の相対的運動により重力波放出を伴い，厳密な意味では定常的な運動が存在しなくなるからである．この相対論的二体問題にはまだ多くの原理的問題を含み，現在でも研究が続いている．そこで，ここでは外部重力場が与えられた場合のテスト粒子の運動について考えることにしよう．これは，外部重力場をつくる天体が十分に重く，その周りを軽い天体が運動する場合の近似的記述と考えて良い．

2 カーブラックホールの周りの粒子

初めに外部重力場としてカー時空を考えよう．これは，軸対称定常時空解で，星の重力崩壊の後に形成されるブラックホールを記述すると考えられる[3)]．カー時空の世界間隔は

$$ds^2 = -\frac{\Delta}{\Sigma}\left(dt - a\sin^2\theta d\varphi\right)^2 + \Sigma\left(\frac{dr^2}{\Delta} + d\theta^2\right) + \frac{\sin^2\theta}{\Sigma}\left[(r^2+a^2)d\varphi - adt\right]^2 \tag{12.1}$$

で表される．ここで，$\Delta \equiv r^2 - 2Mr + a^2$，$\Sigma \equiv r^2 + a^2\cos^2\theta$ で，M と $J = Ma$ はそれぞれブラックホールの重力質量および角運動量を表す．

今，カーブラックホールの周りを動く物体の測地線運動を考えよう．背景が軸対称定常時空であるので，エネルギー（E）と角運動量の z 成分（L）の 2 つの保存量が存在する．2 つのキリングベクトルを $\xi_{(t)}, \xi_{(\phi)}$ とするとそれぞれは $E = -p_\mu \xi^\mu_{(t)}$ と $L = p_\mu \xi^\mu_{(\phi)}$ で与えられる．ここで p_μ は粒子の 4 元運動量である．また，$p_\mu p^\mu = -m^2$ の関係式で定義される粒子の質量 m も保存量になる．カー時空は，ペトロフ分類[傍注1)] でさらに対称性の高い D 型というクラスに属しており，カーター定数と呼ばれる 4 つ目の保存量

[傍注1] ペトロフ（A.Z. Petrov）は 1954 年，座標に依存しない重力場の不変的特徴を見るために，ワイル曲率テンソル $C_{\mu\nu\rho\sigma}$ の代数的構造を調べ，時空を分類した[4)]．これをペトロフ分類と呼ぶ．時空は主ヌルベクトルの縮退の度合いによって分類され，最も一般的な I 型を初めとして II 型，III 型，N 型，D 型がある．

$$\mathcal{C} = p_\theta^2 + \cos^2\theta[a^2(m^2 - E^2) + L^2/\sin^2\theta] \tag{12.2}$$

を持つ[5)]．このことにより，カー時空における粒子の運動は可積分になる．粒子の運動方程式は，具体的には

$$\begin{aligned} \Sigma\frac{d\theta}{d\tau} &= \sqrt{\Theta}, \quad \Sigma\frac{dr}{d\tau} = \sqrt{R}, \\ \Sigma\frac{d\varphi}{d\tau} &= -\left(aE - L/\sin^2\theta\right) + (a/\Delta)P, \\ \Sigma\frac{dt}{d\tau} &= -a\left(aE\sin^2\theta - L\right) + (r^2+a^2)\Delta^{-1}P \end{aligned} \tag{12.3}$$

で与えられる．ここで

$$\begin{aligned} &\Theta \equiv \mathcal{C} - \cos^2\theta\left[a^2(m^2-E^2) + L^2/\sin^2\theta\right], \\ &P \equiv E(r^2+a^2) - La, \quad R \equiv P^2 - \Delta\left[m^2r^2 + (L-aE)^2 + \mathcal{C}\right] \end{aligned} \tag{12.4}$$

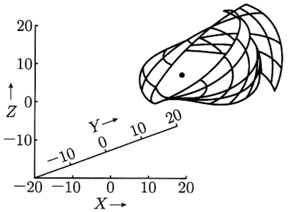


図 12.1　$a^2 = Q^2 = M^2/2$ の場合の極限カー・ニューマンブラックホール中の中性粒子の軌道．粒子の軌道要素は $E = 0.968m$, $L = 2mM$, $\mathcal{C} = 10$ ととっている[6]．

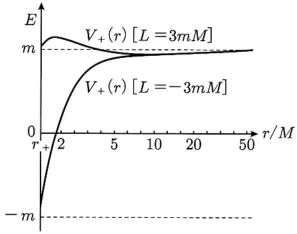


図 12.2　カー時空の赤道面上を運動する粒子の有効ポテンシャル（$a = 0.9M$, $L = \pm 3mM$）．$E < V_+$ の部分が古典的に粒子が存在できない領域になる．

である．

カーター定数がゼロでない場合には，運動は 3 次元的な複雑な軌道を描くが可積分である．図 12.1 には回転と電荷を持った極限ブラックホール（極限カー・ニューマン時空）中の粒子の軌道が示されている[6]．

ここでは簡単のため，赤道面上を運動する粒子についてのみ解析しよう．運動方程式 (12.3) から，赤道面上の運動（$\theta = \pi/2$, $d\theta/d\tau = 0$）は，$\mathcal{C} = 0$ の場合，軌道として矛盾しないことが示される．

運動可能領域は動径方向の運動方程式から $R \geq 0$ で与えられる．これは

$$\alpha E^2 - 2\beta E + \gamma \geq 0 \tag{12.5}$$

という条件になる．ここで

$$\begin{aligned} \alpha &= (r^2 + a^2)^2 - \Delta a^2 \quad (> 0) \\ \beta &= 2LaMr\,, \\ \gamma &= L^2(a^2 - \Delta) - m^2 r^2 \Delta \end{aligned} \tag{12.6}$$

である．(12.5) 式は重力の弱い領域（$r \to \infty$）で $E \geq m$ であることを考慮すると

$$E \geq V_+(r)\,, \quad V_+(r) \equiv \frac{1}{\alpha}\left[\beta + \sqrt{\beta^2 - \alpha\gamma}\right] \tag{12.7}$$

となる．この $V_+(r)$ は，ニュートン力学における有効ポテンシャル $V(r) = -mM/r + L^2/(2mr^2)$ に対応し，この粒子の動径方向の運動を決定する（図 12.2）．

この有効ポテンシャルの極値が円運動を与えるが，それを解析すると，最も内側に存在する安定な円軌道は表 12.1 のようになる．最も内側の安定な円軌道は，ブラックホールの周りの降着円盤の内側の半径を与えるので，その束縛エネルギーやそこからの光の赤方偏移の値なども観測的にも重要となる．

表 12.1　最も内側の安定な円軌道．$B/m = (m - E)/m$ は静止質量で規格化された粒子の束縛エネルギー，極限カー時空は $a = M$ の場合，順行は $La > 0$，逆行は $La < 0$ の場合を表す．

	シュヴァルツシルト時空	極限カー時空（順行）	極限カー時空（逆行）
r/M	6	1	9
E/m	$\frac{2\sqrt{2}}{3}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{5}{3\sqrt{3}}$
B/m	$\left(1 - \frac{2\sqrt{2}}{3}\right) \approx 0.0572$	$\left(1 - \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \approx 0.4426$	$\left(1 - \frac{5}{3\sqrt{3}}\right) \approx 0.0377$
$\lvert L\rvert/(mM)$	$2\sqrt{3}$	$\frac{2}{\sqrt{3}}$	$\frac{22}{3\sqrt{3}}$

ペンローズ過程：ブラックホールからのエネルギー抽出

ブラックホールは何でも吸い込み，光すら出てこられないという強重力の世界である．そのようなところからエネルギーが取り出せると言う．どのようにしてエネルギーを出すのであろうか？ それには次のようにすればよい．

今，ある質量 m の粒子をブラックホール近くに持っていき，そこで 2 つに分ける．それらの質量を m_1, m_2，角運動量を $L_1(>0), L_2(<0)$ とする．このとき，ブラックホールと逆方向に回る粒子 2 のエネルギー E_2 を負になるようにとる．そのようなことはエルゴ領域内でのみ可能になる．赤道面上の粒子で具体的に考えると，エルゴ領域では $L_2 < 0$ に対し $V(r_+) < 0$ となる．実際，図 12.2 からわかるように $L_2 < 0$ の場合，地平線のすぐ外側で粒子のエネルギーを負にとることができる（但しこの粒子は無限遠には出てこられない）．負のエネルギーを持ったこの粒子 2 をブラックホールに落とし，粒子 1 を外に引っ張り出す．初めに持っていたエネルギーを E とすると，エネルギー保存則より $E_1 = E - E_2(> E)$ となり，取り出した粒子 1 のエネルギーは初めに持っていたエネルギーより大きくなる．つまり，ブラックホールからエネルギーを取り出すことができることになる．一方，ブラックホールの質量は $M + E_2(< M)$ となり，減少する．これをペンローズ過程と呼ぶ[7]．

このようなことができるためにはエルゴ領域の存在は必要不可欠で，今の場合，回転がその領域をつくり出している．つまりこのエネルギーはブラックホールの回転エネルギーを取り出したもので，同じことを繰り返すとブラックホールの回転は次第に遅くなり，最終的には回転のないシュヴァルツシルトブラックホールになる．

3 スピン粒子の軌道とカオス

ブラックホールの周りを回る天体は質点ではない．しかしながら，相対性理論では「剛体」という概念は存在しないので，有限の大きさを考慮した天体の軌道を決定するのは，天体自身の構造が関係してくるので単純ではない．しかしながら，天体の大きさが十分無視できる程度に小さい場合，天体の回転が軌道にどう影響を与えるかを考えることはできる．初めに有限の大きさを持たせた天体のエネルギー・運動量テンソルを考え，それを多重極展開し，そのあとで大きさがゼロの極限をとる方法である[8,9]．多重極展開の単極子が質量を，双極子が天体の自転（スピン）を与える．得られる方程式は

$$\frac{Dp^\mu}{D\tau} = -\frac{1}{2} R^\mu{}_{\nu\rho\sigma} v^\nu S^{\rho\sigma}, \qquad (12.8)$$

$$\frac{DS^{\mu\nu}}{D\tau} = p^\mu v^\nu - p^\nu v^\mu \qquad (12.9)$$

である．ここで，τ，$v^\mu = dx^\mu/d\tau$，p^μ，$S^{\mu\nu}$ はそれぞれ軌道の固有時間

($v^\mu v_\mu = -1$)，天体の四元速度，四元運動量およびスピンテンソルである．高次の多重極モーメントは無視しているので，単極子–双極子近似と呼ぶ．

(12.8) 式から重力場が強い場合は曲率項を通してスピン軌道相互作用が効いてくることがわかる．この項のため，運動量と速度が一般には比例しなくなり，v^μ と p^μ の間の関係を与える必要がある．それは大きさを持った天体の重心をどう決めるかということと関係し，そのもっともらしい条件は，$p_\mu S^{\mu\nu} = 0$ で与えられる[9]．この式から v^μ と p^μ の関係は

$$v^\mu = N\left[u^\mu + \frac{1}{2m^2\Delta} S^{\mu\nu} u^\lambda R_{\nu\lambda\rho\sigma} S^{\rho\sigma}\right] \tag{12.10}$$

で与えられる．ここで，$u^\nu \equiv p^\nu/m$ は単位質量あたりの運動量で，$\Delta \equiv 1 + \frac{1}{4m^2} R_{\alpha\beta\gamma\delta} S^{\alpha\beta} S^{\gamma\delta}$, および

$$N \equiv \left[1 - \frac{1}{4\Delta^2 m^2} S_{\mu\nu} u_\lambda S_{\rho\sigma} R^{\nu\lambda\rho\sigma} S^{\mu\alpha} u^\beta S^{\gamma\delta} R_{\alpha\beta\gamma\delta}\right]^{-1/2} \tag{12.11}$$

である．この系はいくつかの保存量を持っている．まず，天体の質量 m ($m^2 \equiv -p_\nu p^\nu$) とスピンの大きさ S ($S^2 \equiv \frac{1}{2} S_{\mu\nu} S^{\mu\nu}$) は保存する[10]．時空に対称性があり，キリングベクトル $\xi^{\ \mu}_{(\mathrm{A})}$ が存在すれば，

$$C_{(\mathrm{A})} \equiv \xi^{\ \mu}_{(\mathrm{A})} p_\mu - \frac{1}{2} \xi^{\ \mu;\nu}_{(\mathrm{A})} S_{\mu\nu} \tag{12.12}$$

も保存量になる[9]．

ここでは外部重力場として最も簡単なシュヴァルツシルト時空を考えよう．対称性から保存する全角運動量の方向を z 方向に取る，つまり $\boldsymbol{J} = (0, 0, J)$ $(J > 0)$ とする．2 つのキリングベクトルを $\xi^{\ \mu}_{(t)}$ と $\xi^{\ \mu}_{(\varphi)}$ とおくと，2 つの非自明な保存量（エネルギーと全角運動量）

$$E \equiv -C_{(t)} = -p_t - \frac{M}{r^2} S^{tr}, \tag{12.13}$$

$$J \equiv C_{(\varphi)} = p_\varphi - r(S^{\varphi r} - r S^{\theta\varphi} \cot\theta) \sin^2\theta \tag{12.14}$$

が得られる．しかしながら，質点の場合とは異なり，スピン粒子はカーター定数のような保存量を持っていない．その結果，系は非可積分になる．実際，数値計算で軌道を解いてみると，その軌道のポアンカレ写像は図 12.3 のようになる[11]．

ポアンカレ写像というのは位相空間における軌道の断面を表しており，カオスの判定によく用いられる．系が可積分の場合は軌道のつくる部分多様体が位相空間内でトーラス構造をつくり，その断面はシャープな円形状の 1 次元的なものになる．一方，カオスのように軌道が非常に不規則になる場合，保存量がないので軌道のつくる部分多様体は位相空間内に拡がり，その断面は 2 次元的に散らばったものになる．図 12.3 からわかるように，スピンが小さいときはポアンカレ断面はトーラス構造を保っているが，スピンの値が大きくなってくるとトーラスが壊れ，ポアンカレ写像は 2 次元的に散らばったものになる．つまり，スピンが大きくなるとシュヴァルツシルト時空のような対称性の高い外部

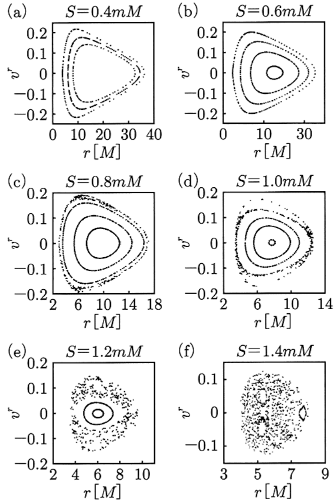


図 12.3　シュヴァルツシルト時空中のスピン粒子の軌道のポアンカレ写像．スピンが小さいときはきれいなトーラス構造が見えるが，大きくなるにつれその構造が壊れ，断面が 2 次元的に広がる．

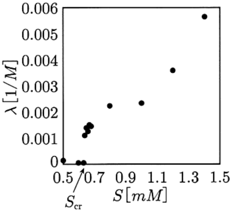


図 12.4　シュヴァルツシルト時空中のスピン粒子の軌道の最大リヤプノフ指数．スピンの値が $0.6mM$ を超えたあたりから正の値になり，カオスが現れる．

重力場中でもカオス的軌道が現れる．

このことをよりはっきりと見るには軌道の最大リヤプノフ指数を計算すればよい．リヤプノフ指数は位相空間上で少しだけ離れた 2 つの軌道がその後どのように離れていくのかを定量的に表す指数で，正の値を取れば 2 つの軌道が時間とともに指数関数的に離れていくことを意味している．これは軌道が初期値に鋭敏であることを示しており，カオスであることを表している．リヤプノフ指数が大きな値をとればとるほどより速く 2 つの軌道は離れていくので，カオスは強くなる．

図 12.4 に，最大リヤプノフ指数がスピンの値に対しどう変わるかを示した．実際にスピンが $S \geq 0.64mM$ においてはリヤプノフ指数が正の値になり，カオスが起こっていることがわかる．

12.4 いろいろな非可積分系と重力波観測

カー時空やシュヴァルツシルト時空のような対称性の高い時空でも，テスト粒子にスピンのような属性を持たせるとその軌道がカオス的になり得ることがわかった．ここでは，系を少し変えるだけで同じように非可積分になる他の例

を示そう．以下が実際に数値計算を実行しカオスが起こることが示されたいくつかの例である．

(i) シュヴァルツシルト時空の摂動[12,13]
(ii) シュヴァルツシルト時空 ＋ 一様外部磁場[14]
(iii) カー時空 ＋ ハロー（双極的重力場）[15]
(iv) 平面重力波 ＋ 一様磁場[16]
(v) 2 つの極限ブラックホールの平衡解[17,18]
(vi) 多重特異点時空（複数の裸の特異点を持つカーゾン時空解）[19]

(iv)～(vi) は複数の固定した外部重力源を考えており，この背景自体が不安定と考えられるが，(i)～(iii) は対称性の高い軸対称定常時空にごく自然な外部要因を加えたものである．これらの例からも，カオスという現象が一般相対性理論においても普遍的に現れることがわかるであろう．

このようなカオス的振舞いは現象論的にどのような重要な効果をもたらすであろうか．すぐに思い浮かぶのが重力波の観測である．相対論的天体の運動は通常重力波の放出を伴う[23]．しかしながら重力波は物質との相互作用が非常に弱いため，その観測にはどのような重力波が来るかある程度予想し，テンプレートを作成しておき，観測データと比較し，小さなシグナルを多くの雑音から何とか取り出せるようにする．ところが重力源の天体の運動がカオス的だとそのようなテンプレートがつくれるのであろうか？

重力波源として有望なのは，前にも述べたが連星中性子星や連星ブラックホールの合体である[23]．それらの軌道がスピン軌道相互作用でカオス的になったらテンプレート作成に困難を生ずるであろう．実際，2.5 次のポストニュートン近似を用いた連星系の軌道計算でカオスが起こることが示された[20]．しかし，別のグループは，リヤプノフ指数を示すことでその複雑な運動がカオスではないと主張している[21]．一般相対性理論においては時間座標の取り方に任意性があり，リヤプノフ指数の定義も一意的ではないのでどちらの主張が正しいかまだわからないが，仮に系が非可積分だとしても，このカオスは相対論的な効果（曲率を介したスピン軌道相互作用）によるものと考えられるので，後者のグループが主張するように，連星系が合体するまでにカオスが発生するだけの十分な時間はないと考えられる．また，ここに示した外部重力場 ＋ テスト粒子の系が近似的に正しいと考えられる現実の系（例えば巨大ブラックホールとその周りを回る天体）と考えたとしても，カオスに必要なスピンの臨界値は大きすぎ（$S_{\rm cr} = 0.64mM \gg m^2$），現実的にはカオスは発生しないと考えられる．

しかしながら他の要因（例えばブラックホールの周りのディスクなど）が加わり，現実的な系が非可積分になることは十分に考えられ，その結果，重力源がカオス的運動を伴うことはあり得るであろう．そのような系からの重力波予想をしておくこと，特にカオス現象特有の性質を検出される重力波の情報から抽出することは重要な課題と考える[22]．

5 時空のカオス

ここまでは粒子の軌道運動に対するカオス的振舞いをみてきた．しかし，一般相対性理論の特徴は，重力場そのものが非線形となる点にあり，重力場，つまり時空の振舞いに非線形物理学として本当に新しい現象が現れるだろう．第10回では非線形可積分系の典型的手法である逆散乱法を用いたアインシュタイン方程式の解の構成法について述べた[24]．当然，カオス的に振る舞う時空解も考えられる．実際，第9回で述べた一様・非等方宇宙モデル（ビアンキモデル）がそれにあたる[25]．このモデルでは，宇宙の進化が2次元ポテンシャル中の点粒子の運動として記述される．特に，真空のビアンキタイプIX時空は，ちょうどビリヤードのようにポテンシャル障壁が閉じていて，点粒子の軌道変化，つまり宇宙の進化が過去の特異点に向かってカオス的に振る舞う[26]．このような時空のカオスは，ビアンキタイプIX時空を除き，まだあまり研究されていないが，今後重要な課題となるかもしれない．

参考文献

1) H. Poincaré,「Les Methodes nouvelles de la Mecanique celeste」(Gauthier–Villars, Paris, 1892) [英訳「New Method of Celestrical Mechanics」(Springer, 1993)].
2) D. Lynden-Bell, R. Wood, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **138** (1968) 495.
3) 前田恵一「重力理論入門」第11回，数理科学（2007年5月号）.
4) A.Z. Petrov, *Sci. Nat. Kazan State University*, **114** (1954) 55.
5) B. Carter, *Phys. Rev.* **174** (1968) 1559.
6) M. Johnstone and R. Ruffini, *Phys. Rev.* **D10** (1974) 2324.
7) R. Penrose, *Nuovo Cimento* **1** (1969) 252.
8) A. Papapetrou, *Proc. Roy. Soc.* **A209** (1951) 248.
9) W.G. Dixon, *Proc. Roy. Soc.* **A314** (1970) 499; *ibid* **A319** (1970) 509; *J. Gen. Rel. Grav.* **4** (1973) 193; *Phil. Trans. Roy. Soc.* **277** (1974) 59.
10) E. Wald, *Phys. Rev.* **D6** (1972) 406.
11) S. Suzuki and K. Maeda, *Phys. Rev.* **D56** (1996) 4848.
12) L. Bombelli and E. Calzetta, *Class. Quantum Grav.* **9** (1992) 2573.
13) R. Moeckel, *Commun. Math. Phys.* **150** (1992) 415.
14) V. Karas and D. Vokrouhlicky, *J. Gen. Rel. Grav.* **24** (1992) 729.
15) P.S. Letelier and W.M. Viera, *Phys. Rev.* **D56** (1997) 8095.
16) J. Podolsky and K. Vesely, *Phys. Rev.* **D58** (1998) 081501.
17) G. Contopoulos, *Proc. R. Soc.* **A431** (1990) 183; *ibid.* (1991) 555.
18) C.P. Dettmann, N.E. Frankel, and N.J. Cornish, *Phys. Rev.* **D50** R618.
19) Y. Sota, S. Suzuki, and K. Maeda, Class. *Quantum Grav.* **13** (1996) 1241.
20) J. Levin, *Phys. Rev. Lett.*, **84** (2000) 3515;
N.J. Cornish and J. Levin, *Phys. Rev. Lett.*, **89** (2002) 179001.
21) J.D. Schnittman and F.A. Rasio, *Phys. Rev. Lett.*, **87** (2001) 121101.
22) S. Suzuki and K. Maeda, *Phys. Rev.* **D61** (2000) 024005;
K. Kiuchi and K. Maeda, *Phys. Rev.* **D70** (2004) 064036.
23) 前田恵一「重力理論入門」第7回，数理科学（2006年11月号）.
24) 前田恵一「重力理論入門」第10回，数理科学（2007年3月号）.
25) 前田恵一「重力理論入門」第9回，数理科学（2007年2月号）.
26) V.A. Belinski, I.M. Khalatnikov, and E.M. Lifshitz, *Adv. Phys.* **19** (1970) 525;
J.D. Barrow, *Phys. Rep.* **85** (1982) 1.
27) 古沢豊明，別冊・数理科学「相対論の座標」(1988) p 158.

（まえだ・けいいち，早稲田大学理工学術院）

第9回 a primer of Probability

使うための確率論入門

ランダムウォークの到達点

渡 辺　浩

今回と次回は，中心極限定理を取り上げます．前回調べた2項分布と正規分布の関係はこの定理の片鱗とも言えるものですが，確率分布の列が次第に正規分布に近づくという現象はより広い状況で見出されるものであり，中心極限定理は，このような意味で普遍的な性格をもつ定理です．ここでは，直観的な理解を助けるために，ランダムウォークを具体例として考えます．

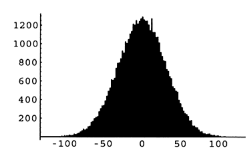
Theme　ランダムウォークのシミュレーション

原点を出発点として，数直線上をランダムに動く点Pを考える．Pが k ステップ目に移動する量 x_k が従う確率法則として，次の2種類のモデルを設定する．

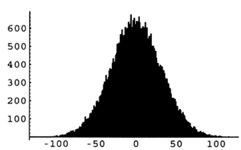
モデル1: x_k は確率 $\frac{1}{2}$ でそれぞれ 1 と -1 の値を取る．
モデル2: x_k は区間 $[-1, 1]$ に一様に分布する．

ただし，$x_1, x_2, x_3, \cdots$ は独立とする．これらのモデルにおいて，Pが n ステップ動いた後の座標 $X_n = x_1 + x_2 + \cdots + x_n$ に注目する．

下の図は，コンピューターの擬似乱数を用いてシミュレートした結果である．各モデルに対して，50000 本のランダムウォークをサンプルとして発生させ，モデル1では，1000 ステップで止めて $X_{1000} = a$ を満たすサンプルの数を，モデル2では，3000 ステップで止めて $a \leq X_{3000} < a+1$ を満たすサンプルの数を数え，階級 $a(=0, \pm1, \pm2, \cdots)$ のカウントとした．



モデル1



モデル2

このように，モデル 1 における X_{1000} とモデル 2 における X_{3000} の分布はよく似ている．(モデル 1 においては X_{1000} が偶数値しか取らないので，モデル 1 のカウントはモデル 2 の約 2 倍になっている．)

モデル 1 とモデル 2 の各ステップ x_k は全く異なる確率法則に従っているのに，到達点 X_n の分布がこのように似てしまうのはなぜだろうか．

9.1 正規分布による近似

点 P がモデル 1 の設定に従って n ステップ移動したとする．n ステップのうち，$+1$ だけ移動した回数を k とすると，k は 2 項分布 $B\left(n, \dfrac{1}{2}\right)$，すなわち

$$p_n(k) = {}_n\mathrm{C}_k \frac{1}{2^n}\ , \quad k = 0, 1, 2, \cdots, n \tag{9.1}$$

に従い，到達点の座標は

$$X_n = 2k - n \tag{9.2}$$

で与えられる．

前回示したように，n が大きいとき，2 項分布 $B\left(n, \dfrac{1}{2}\right)$ は正規分布 $N\left(\dfrac{n}{2}, \dfrac{n}{4}\right)$ で近似できる[傍注1]．したがって，X_n の分布は近似的に正規分布 $N(0, n)$ となる（定理 8.2)．特に X_{1000} の分布は近似的に $N(0, 1000)$ となり，0 を中心にして $\pm\sqrt{1000}$ 程度の幅に分布するだろう．実際，シミュレーションの結果はそうなっている．

［傍注 1］ 実は「近似できる」という表現は粗雑に過ぎる．この「近似」の意味を反省しなければならないことが後で明らかになる．

しかし．この論法ではモデル 2 を調べることができない．モデル 1 とモデル 2 を統一的に扱うために「特性関数」を導入する．

9.2 特性関数

確率変数 X の特性関数を定義する．まず X の値が離散分布する場合を考える．すなわち，X は高々可算な実数の集合 A に値を取る確率変数で，

$$p(a) = \mathrm{Prob}[X = a]\ , \quad a \in A$$

と置くと，

$$\sum_{a \in A} p(a) = 1$$

が成り立つとする．このとき，

$$\varphi_X(\xi) = \sum_{a \in A} p(a) e^{i\xi a}\ , \quad \xi \in \mathbb{R} \tag{9.3}$$

で定義される関数を X の**特性関数**と言う．(9.3) の右辺は，すべての実数 ξ に対して収束し，

$$|\varphi_X(\xi)| \leq \sum_{a\in A} p(a) = 1$$

が成り立つ．特に，A を非負整数全体の集合 $\mathbb{Z}_+ = \{0, 1, 2, \cdots\}$ とし，$z = e^{i\xi}$ とおくと，

$$\varphi_X(\xi) = \sum_{a=0}^{\infty} p(a) z^a$$

となり，4 回目に考えた確率母関数の定義と一致する．

次に，X の値が連続分布する場合，X の密度関数 $f(x)$ を用いて，X の特性関数を

$$\varphi_X(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{i\xi x} dx\ , \quad \xi \in \mathbb{R} \tag{9.4}$$

で定義する．(9.4) の右辺はすべての実数 ξ に対して収束し，

$$|\varphi_X(\xi)| \leq \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1$$

が成り立つ．

特性関数の定義 (9.3) と (9.4) は，どちらも，$e^{i\xi X}$ の期待値の形

$$\varphi_X(\xi) = \mathrm{Exp}[e^{i\xi X}] \tag{9.5}$$

に書くことができる．これが特性関数の一般的な定義である．また，特性関数は $\varphi_X(0) = 1$ を満たすことに注意しておく．

特性関数を使って X の平均と分散を求めることができる．

定理 9.1　確率変数 X に対し，平均，分散が定義されるなら，特性関数 $\varphi_X(\xi)$ は 2 回連続微分可能（$\varphi_X''(\xi)$ が存在して連続）であり，

$$X \text{ の平均} = \frac{1}{i}\frac{d\varphi_X}{d\xi}(0),$$

$$X \text{ の分散} = -\frac{d^2\varphi_X}{d\xi^2}(0) + \left(\frac{d\varphi_X}{d\xi}(0)\right)^2 = -\frac{d^2 \log\varphi_X}{d\xi^2}(0)$$

が成り立つ．◇

証明　形式的には

$$\frac{d\varphi_X}{d\xi}(\xi) = \frac{d}{d\xi}\mathrm{Exp}[e^{i\xi X}] = \mathrm{Exp}\left[\frac{d}{d\xi}e^{i\xi X}\right] = i\mathrm{Exp}[Xe^{i\xi X}], \tag{9.6}$$

$$\frac{d^2\varphi_X}{d\xi^2}(\xi) = \mathrm{Exp}\left[\frac{d^2}{d\xi^2}e^{i\xi X}\right] = -\mathrm{Exp}[X^2 e^{i\xi X}] \tag{9.7}$$

であるから，$\varphi_X(0) = 1$ に注意すれば，定理の等式が得られる．厳密には，期待値と微分の交換（無限和と微分の交換，積分と微分の交換）を正当化しなければならない．この際，平均，分散が定義されるという仮定の下で，定理 5.1 の証明と同様の論法を用いることができる．□

以下に，特性関数の例を挙げる．

例 9.1 モデル 1 で考えた k ステップ目の移動量 x_k の場合，$A = \{-1, 1\}$ であり，

$$\mathrm{Prob}[x_k = \pm 1] = \frac{1}{2}$$

であるから，

$$\varphi_{x_k}(\xi) = \frac{1}{2}(e^{-i\xi} + e^{i\xi}) = \cos\xi \tag{9.8}$$

となる． ◇

例 9.2 モデル 2 で考えた k ステップ目の移動量 x_k の場合，密度関数

$$f(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{2}, & |x| \leq 1 \\ 0, & |x| > 1 \end{cases}$$

を持つから，

$$\varphi_{x_k}(\xi) = \int_{-1}^{1} \frac{1}{2} e^{i\xi x} dx = \frac{\sin\xi}{\xi} \tag{9.9}$$

となる． ◇

例 9.3 正規分布 $N(0, n)$ に従う確率変数 X を考える．X の密度関数は

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2n\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2n}\right) \tag{9.10}$$

で与えられ，

$$nf'(x) = -xf(x)$$

を満たす．よって，

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi}\varphi_X(\xi) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x)(-ix)e^{-i\xi x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} inf'(x)e^{-i\xi x} dx \\ &= \left[inf(x)e^{-i\xi x}\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} inf(x)(-i\xi)e^{-i\xi x} dx \\ &= -n\xi\varphi_X(\xi) \end{aligned}$$

が成り立つ．これを $\varphi_X(\xi)$ についての微分方程式と見て，初期条件 $\varphi_X(0) = 1$ の下で解けば，

$$\varphi_X(\xi) = \exp\left(-\frac{n}{2}\xi^2\right) \tag{9.11}$$

が得られる． ◇

9.3 独立性

ランダムウォークの到達点 X_n の特性関数を求めるために，各ステップ

$x_k(k=1,2,\cdots)$ が独立であることを利用する．まず，独立性の定義を確認しよう．

実数値を取る確率変数 X,Y を考える．任意の区間 I,J に対し，

$$\mathrm{Prob}[X\in I \text{ かつ } Y\in J]=\mathrm{Prob}[X\in I]\mathrm{Prob}[Y\in J] \tag{9.12}$$

が成り立つとき，X と Y は**独立**であると言う．X の値が定まる（物理的）プロセスと Y の値が定まる（物理的）プロセスが互いに影響を及ぼさないときには，X と Y は独立になると考えられる[傍注2]．

［傍注 2］ 具体的な現象において，独立性の仮定が妥当であるかどうかを統計的に検証するには，χ^2 検定などの方法が用いられる．

離散的な確率変数 X,Y の場合，X,Y の関数 $F(X),G(Y)$ に対し，

$$\begin{aligned}\mathrm{Exp}[F(X)G(Y)]&=\sum_a\sum_b F(a)G(b)\mathrm{Prob}[X=a \text{ かつ } Y=b]\\&=\sum_a\sum_b F(a)G(b)\mathrm{Prob}[X=a]\mathrm{Prob}[Y=b]\\&=\mathrm{Exp}[F(X)]\mathrm{Exp}[G(Y)]\end{aligned} \tag{9.13}$$

が成り立つ．

X,Y が連続分布する場合を考えるために，X,Y の同時分布密度を $h(x,y)$ とする．すなわち，任意の区間 I,J に対して，

$$\mathrm{Prob}[X\in I \text{ かつ } Y\in J]=\int_I dx\int_J dy\ h(x,y)$$

が成り立つとする．このとき，X,Y の関数 $H(X,Y)$ の期待値は，

$$\mathrm{Exp}[H(X,Y)]=\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dy\ H(x,y)h(x,y) \tag{9.14}$$

のような積分で表せる．そして，X,Y の密度関数をそれぞれ $f(x),g(y)$ とすれば，(9.12) は

$$\int_I dx\int_J dy\ h(x,y)=\int_I dx\int_J dy\ f(x)g(y)$$

となり，独立な確率変数の同時分布密度は

$$h(x,y)=f(x)g(y) \tag{9.15}$$

のように，単独の密度関数の積に分解することが分かる．したがって，(9.14), (9.15) を用いれば，(9.13) と同様の結論が得られる．

以上の議論は，3 つ以上の確率変数に一般化できる．任意の区間 $I_1,I_2,\cdots,I_n$ に対し，

$$\mathrm{Prob}[X_1\in I_1 \text{ かつ } X_2\in I_2\cdots \text{ かつ } X_n\in I_n]=\prod_{k=1}^{n}\mathrm{Prob}[X_k\in I_k] \tag{9.16}$$

が成り立つとき，確率変数 $X_1,X_2,\cdots,X_n$ は**独立**であると言う[傍注3]．このとき，次の定理が成り立つ．

［傍注 3］ すべてのペア X_i,X_j が独立であることと，$X_1,X_2,\cdots,X_n$ が全体として独立であることは同値ではない．

定理 9.2 確率変数 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ が独立のとき，

$$\begin{aligned}&\mathrm{Exp}[F_1(X_1)F_2(X_2)\cdots F_n(X_n)]\\&= \mathrm{Exp}[F_1(X_1)]\mathrm{Exp}[F_2(X_2)]\cdots \mathrm{Exp}[F_n(X_n)]\end{aligned} \tag{9.17}$$

が成り立つ．ただし，関数 $F_1(\cdot), F_2(\cdot), \cdots, F_n(\cdot)$ は，上式の両辺が定義されるような関数であるとする． ◇

特に (9.17) において，

$$F_k(x) = e^{i\xi x}\ , \quad k = 1, 2, \cdots, n$$

とすれば，

$$\begin{aligned}&\mathrm{Exp}[F_k(X_k)] = \mathrm{Exp}[e^{i\xi X_k}] = \varphi_{X_k}(\xi),\\&\mathrm{Exp}[F_1(X_1)F_2(X_2)\cdots F_n(X_n)] = \mathrm{Exp}[e^{i\xi(X_1+X_2+\cdots+X_n)}]\\&\qquad\qquad = \varphi_{X_1+X_2+\cdots+X_n}(\xi)\end{aligned}$$

となるから，次の定理を得る．

定理 9.3 独立な確率変数 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ に対し，

$$\varphi_{X_1+X_2+\cdots+X_n}(\xi) = \prod_{k=1}^{n} \varphi_{X_k}(\xi) \tag{9.18}$$

が成り立つ[傍注4]． ◇

[傍注 4] 細かいことを言えば，確率変数 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ の中に離散分布でもなく連続分布でもない確率分布が含まれている場合などには，この定理は証明されていない．問題を統一的に解決するためには，測度論に基づいた確率論の定式化が必要である．

定理 9.1 と定理 9.3 を組み合わせると，次の定理が得られる．

定理 9.4 確率変数 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ が独立であり，それぞれ分散をもつとき，

$$(X_1 + X_2 + \cdots + X_n)\text{ の分散} = \sum_{k=1}^{n} X_k\text{の分散} \tag{9.19}$$

が成り立つ． ◇

定理 9.3 を用いて，ランダムウォークの到達点 $X_n = x_1 + x_2 + \cdots + x_n$ の特性関数を求めよう．各ステップ $x_1, x_2, \cdots, x_n$ は独立であるから，(9.8), (9.9) から，

$$\text{モデル 1: } \varphi_{X_n}(\xi) = \cos^n \xi, \tag{9.20}$$

$$\text{モデル 2: } \varphi_{X_n}(\xi) = \left(\frac{\sin \xi}{\xi}\right)^n \tag{9.21}$$

が得られる．

問題は，モデル 1, 2 の確率変数 X_n の確率分布と正規分布 $N(0, n)$ を比較することである．しかし，(9.11), (9.20), (9.21) で与えられる特性関数は，少なくとも外見上は似ていない．これは 3 つの確率分布がそのままの形では‘近くない’ことを意味している．それでは，どのような意味で‘近い’と言えるのか．この問題を次回考える．

（わたなべ・ひろし，日本医科大学数学教室）

生体内相互作用ネットワークの数理モデル

阿久津 達也

1. ネットワーク科学とバイオインフォマティクス

ネットワーク科学は「もの」と「もの」との関係のなす構造を様々な視点から解析していく分野であると考えられる．その対象は多岐にわたるが，生体内の相互作用ネットワークは重要な対象の一つであり，特に，代謝ネットワーク，遺伝子ネットワーク，タンパク質相互作用ネットワークについて数多くの研究が行われてきた．代謝とは生体内における化学反応であり，化合物がものに対応する．遺伝子ネットワークでは遺伝子がものに対応し，タンパク質相互作用ネットワークではタンパク質がものに対応する．もちろん，これらのネットワークは互いに独立しているわけではなく，化合物，タンパク質，遺伝子間での相互作用も数多くあるが，すべてを統合してしまうと複雑過ぎることもあり，別々に取り扱われることが多い．興味深いことに，これら3種類のネットワークも，WWWやインターネットなどと共通の性質，特に，スケールフリー性[17]（頂点の次数分布がべき乗則に従うこと）を持つと報告されている[7,11,12]．

ところで，筆者の専門はバイオインフォマティクスである．バイオインフォマティクスはDNA配列を初めとする生物情報データ解析のための情報処理技術の開発と，情報処理技術を用いての生物学的知識の発見の2つを主目的とする学問分野であり，生命情報科学などと訳される．バイオインフォマティクスの研究対象はDNA配列やアミノ酸配列などが主であったが，1990年代後半より生体内ネットワークに関する研究も数多く行われるようになってきた．その理由として，実験技術の進歩により数多くの相互作用データが産出されてきたこともあるが，個々の論文などに分散していた相互作用データなどが収集，整理され，データベースにまとめられたことがあげられる．実際，筆者の所属する京大バイオインフォマティクスセンターでもKEGGデータベースが構築されており，代謝ネットワークを初めとして生体に関連する様々な情報が格納されている[13]．本稿ではこのKEGGとその関連研究を紹介するとともに，筆者らが行っている生体内ネットワークの数理モデルに関する研究を紹介する．

2. KEGGデータベース

KEGGはKyoto Encyclopedia of Genes and Genomesを意味し，京大バイオインフォマティクスセンターと東大ヒトゲノム解析センターの協力の下，金久實教授を中心として開発されている生命システム情報統合データベースである[13]

(http://www.kegg.jp). 筆者はKEGGの開発に直接携わっているわけではないが，頻繁に利用している．KEGGは生命システムに関するデータを網羅的に収集，分類，整理しようというシステムであり，様々な種類のデータを格納している．単にデータを格納するだけでなく，検索や解析のための機能も備えている．KEGGは代謝ネットワークおよび関連する化合物データを大量に格納していることが大きな特徴であり，インターネットを通じて世界中から幅広く利用されている．KEGGは常に進化を続けており，近年では，糖鎖，薬剤，感染症に関するデータなどが新たに整理されつつある．

図1に示すのはKEGGに格納されている代謝ネットワークの一部分である．KEGGにはこのようなネットワークが数多く格納されている．この図1において小さな丸は化合物を表し，長方形に囲まれた数字は酵素の識別番号を表している．例えば，3.1.1.17という数字を囲む長方形の左右は，D-Glucono-1,5-lactoneという化合物が，3.1.1.17という識別番号を持つ酵素を触媒とする化学反応により，D-Gluconateという化合物に変換されることを意味している．これらの丸や長方形は画面上でクリック可能であり，丸をクリックすると対応する化合物の化学構造などの情報が表示され，長方形をクリックすると対応する酵素に関する情報

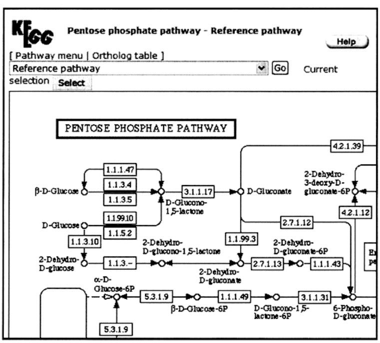


図1　KEGGにおける代謝ネットワークの例．

が表示される．さらに，それぞれの酵素が触媒する化学反応式も表示できる．また，これらのデータはKGMLと呼ばれるXMLに基づくデータ形式により整理されており，電子的な形式で利用することもできる．

バイオインフォマティクスセンターでは，このKEGGに格納されたデータをもとに，その解析のための情報技術の開発や，生物学的知識の発見に関して様々な研究が行われている．例えば，化合物データの検索や分類[16]，代謝ネットワークの進化の解析[20]，糖鎖データ解析のための確率モデル[4]などの研究が行われている．

3. タンパク質ドメインの進化モデル

前にも述べたように代謝ネットワーク，遺伝子ネットワーク，タンパク質相互作用ネットワークはいずれもスケールフリーであるとの報告[7,11,12]があるが，それについては様々な議論がある[5,21]．しかしながら，スケールフリーかどうかに関わらずネットワーク構造と進化の間には密接な関係があるはずで，生体内ネットワーク構造の特徴を説明するのに適した進化の数理モデルを考えることは有用である．スケールフリーネットワークの構成法として有名な優先的選択型成長モデル[6]は人工的もしくは社会的なネットワークのモデルとしてはある程度妥当であると思われるが，生物の進化との関連性は明らかではない[7]．遺伝子重複や突然変異の効果をより積極的に取り入れた数理モデル[8]が提案されているが，生物においてはネットワークそのものが進化するわけではなく，進化するのは基本的にはDNA配列やタンパク質配列である．そこで，筆者らは，タンパク質のドメイン構造の進化に基づくモデル[18]を提案し，タンパク質相互作用ネットワークのスケールフリー性を導いている[1]．

タンパク質のドメインとは立体構造上，もしくは，機能上のひとまとまりの部分であり，タンパク質を構成する部品と考えることができる．一般に，個々のタンパク質は1個から数個のドメイン

から構成されているが，ここでは簡単のために，1個のタンパク質は1個のドメインから構成されているものとする．ただし，同じドメインから構成されるタンパク質が複数種類あってもよいものとする．それらはもともと同じ遺伝子から遺伝子重複により生成されたタンパク質であると解釈できる．なお，遺伝子はタンパク質に翻訳されることにより機能を発現するものが多いので，ここでは簡単のためにタンパク質は遺伝子と同一視できるものと仮定する．

筆者らのモデルでは，最初に相異なるドメインからなる数種類のタンパク質があったとし，単位時間ごとに次のいずれかの事象が起きるものとする（図2参照）．

遺伝子重複：現存するタンパク質の中から1種類のタンパク質が等確率でランダムに選ばれ，そのタンパク質と同じドメインからなる新たな種類のタンパク質が生成される．

突然変異：現存するドメインとは全く別の新たな種類のドメインからなるタンパク質が生成される．

ただし，遺伝子重複は確率 a で生じるものとし，突然変異は確率 $1-a$ で生じるものとする．また，ここでの突然変異はドメインの種類を変えるような大きなものであり，小さな突然変異を何度も繰り返した結果とも解釈できる．

ここで，$P_D(k)$ を，同じドメインを持つ k 種類のタンパク質が存在するようなドメインの頻度とする．つまり，k 個のコピーを持つようなドメインの頻度とする．例えば，図2ではドメインが図形で表現されているが，上半分のタンパク質群においては，コピーが1個だけのドメインは丸および十字型の2種類であり，全部で5種類のドメインがあるので，$P_D(1) = 2/5$ となる．2個のコピーがあるドメインは3角形および6角形の2種類であるので $P_D(2) = 2/5$ となり，3個のコピーがあるドメインは正方形の1種類だけであるので $P_D(3) = 1/5$ となり，4以上の k については $P_D(k) = 0$ となる．興味深いことに，この $P_D(k)$ はべき乗則にほぼ従うが，そのことは平均場近似という考え方を用いて示すことができる．平均場近似は数学的厳密性に欠けるという問題はあるものの，比較的簡単に適用できる場合が多いため，多くのネットワークモデルの解析に利用されている[17)]．

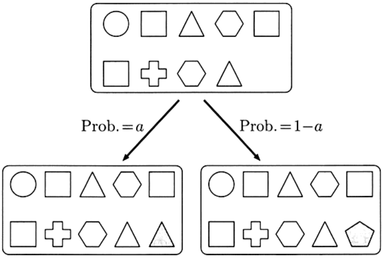


図2　タンパク質ドメインの進化モデル．

d をあるドメインとし，$k_d(t)$ を時刻 t におけるドメイン d のコピー数とする．すると，単位時間あたりにタンパク質は1コピー分だけ増えるため，時刻 t におけるコピー数の総計は t であるものと近似する．よって，時刻 t において遺伝子重複によりドメイン d からなるコピーが生成する確率は $a \cdot (k_d(t)/t)$ となる．ここで，確率 $a \cdot (k_d(t)/t)$ でコピーが1個増えると考える代わりにコピーが $a \cdot (k_d(t)/t)$ だけ増えるという平均場近似の考え方を用いると，

$$\frac{dk_d(t)}{dt} = a \cdot \left(\frac{k_d(t)}{t}\right)$$

という微分方程式を得る．ここで，ドメイン d が突然変異により最初に生成された時刻を t_d とおくと，初期条件は $k_d(t_d) = 1$ となる．この初期条件の下で，上の微分方程式を解くと

$$k_d(t) = \left(\frac{t}{t_d}\right)^a$$

を得る．ここで $k_d(n) = k$ を解くことにより，時刻 n においてコピー数が k であるようなドメイン d の生成時刻が $t_d = k^{-(1/a)} \cdot n$ となることがわかる．よって，時刻 t において k が1だけ異な

るためには，生成時刻が

$$\frac{d}{dk}\left(\frac{n}{k^{(1/a)}}\right) = -\left(\frac{1}{a}\right)\cdot\left(\frac{n}{k^{[1+(1/a)]}}\right)$$

だけ異なればよいことがわかる．ここで，一定時間内にできる新たなドメインの種類数はほぼ一定であることを仮定できるので，$O(n\cdot k^{[-1-(1/a)]})$ 種類程度のドメインが時刻 n において k 個程度のコピー数を持つことがわかる．よって，$P_D(k) \propto k^{[-1-(1/a)]}$ というべき乗則を得る．

上で示した解析は優先的選択型成長モデルにおける解析[6,17]とほとんど同じである．しかしながら，このモデルはべき指数が $-1-(1/a)$ となっており，遺伝子重複が起きる確率 a に依存する点が異なる．一般に a は 1 に近いと考えられるので，$P_D(k) \propto k^{-2}$ に近いべき乗則が成立することが期待される．実際，データベース解析結果からも -2 に近いべき指数が得られており[18]，この結果の妥当性を示唆するものとなっている．

これまで各タンパク質が 1 個のドメインからなる場合のみを考えてきたが，実際には複数のドメインから構成されるタンパク質が数多く存在する．その場合，ドメインのシャッフルや挿入なども考える必要が出てくる．するとモデルが複雑になるため数理的な解析は困難となる．しかし，シミュレーションによる解析は可能であり，類似の結果が得られている[18]．

4. タンパク質相互作用ネットワーク

前節ではタンパク質ドメインの進化モデルについて説明した．一方，それとは独立に，タンパク質相互作用の計算機による予測のために，ドメインに基づくタンパク質相互作用の確率モデルが提案され[19]，筆者らも研究を行ってきた．あるとき，このドメイン進化のモデルと相互作用のモデルを組み合わせることを思いつき，次のモデルを考えた[1]．

- タンパク質ドメインの分布は $P_D(k)$ に従う．
- 1 個のタンパク質は 1 個のドメインだけからなる．
- どのドメインペアが相互作用するかは，等確率でランダムに決まる．
- 2 種類のタンパク質は，それぞれに含まれるドメインどうしが相互作用すれば相互作用し，そうでなければ相互作用しない．

このモデルに基づいて，タンパク質を頂点とし，相互作用するタンパク質ペアを辺で結ぶことにより，タンパク質相互作用ネットワークを構成することができる．このようにしてできたネットワークはスケールフリー性を持つが，その概略は次のようにしてわかる．$P_D(k) \propto k^{-\gamma}$ とし，n_X をドメイン X のコピー数とする．一対のドメインペア (A, B) をランダムに選んだ場合，コピー数 x とコピー数 y のドメインペアが選ばれる確率は $x^{-\gamma}\cdot y^{-\gamma}$ に比例する．また，ドメイン A, B が相互作用すれば，次数が n_B のタンパク質が n_A 種類でき，次数が n_A のタンパク質が n_B 種類できる．よって，次数が y のタンパク質は

$$\mathrm{Prob}(n_B = y)\cdot E[n_A] \propto y^{-\gamma}\int_{x=1}^{\infty} x^{-\gamma}\,dx = \frac{1}{\gamma-1}y^{-\gamma}$$

のオーダー個程度できることになる．このドメインペアをランダムに選ぶという操作をある回数繰り返すことになるが，その回数がそれほど大きくなければ，やはりその次数は $O(y^{-\gamma})$ 程度となり，べき乗則が導かれる．なお，$\gamma \leq 2$ の場合には積分が発散するので，x の取り得る範囲を制限する必要がある．

前に述べたように実際の $P_D(k)$ のべき指数は -2 に近いので，この結果は，タンパク質相互作用ネットワークにおけるべき指数も -2 に近いという観測結果[7,12]とほぼ一致する．よって，非常に簡単なモデルと解析により，タンパク質相互作用ネットワークのスケールフリー性が説明できたことになる．もちろん，モデルが単純過ぎるため，実際のタンパク質相互作用ネットワークの本質を捉えていない可能性はあるので，妥当性についての更なる検証は必要である．

5. ブーリアンネットワーク

スケールフリーネットワークは多くの研究者の興味を引き，数多くの構成法が提案されてきた．しかしながら，ネットワークの構成法については研究が一段落しつつあると思われる．これまでの連載記事にもあるように，今後はネットワークの動的挙動の解析が重要になってくるものと思われる．動的挙動解析のために様々な数理モデルが提案されているが，ここではブーリアンネットワークを紹介する[14]．

ブーリアンネットワークは（遺伝子の制御関係の成す）遺伝子ネットワークの数理モデルの一つである．ブーリアンネットワークでは，頂点が遺伝子に対応し，頂点は 1 か 0 のいずれかの値（ブール値）をとる．ここで，1 は遺伝子が発現していることに，0 は遺伝子が発現していないことに対応する．頂点の状態は単位時間ごとに同期して変化するが，その変化の規則はブール関数により与えられる．一言で言うとクロックに同期して変化するデジタル回路により遺伝子間の制御関係を表現しようというモデルである．

具体的には，ブーリアンネットワークは頂点集合 $\{v_1, \cdots, v_n\}$ とブール関数の集合 $\{f_1, \cdots, f_n\}$ により定められる．ただし，各頂点 v_i の状態は離散時刻 t $(t = 0, 1, 2, \cdots)$ に対してのみ定義され，各時刻において 0 か 1 のどちらかをとる．頂点 v_i の時刻 t における状態を $v_i(t)$ とすると，頂点の状態は

$$v_{i+1}(t+1) = f_i(v_{i_1}(t), \cdots, v_{i_{k_i}}(t))$$

という規則に従って変化する．ここで，$v_{i_1}, \cdots, v_{i_{k_i}}$ は遺伝子 v_i を直接的に制御する遺伝子に対応する．

この定義よりブーリアンネットワークの状態系列は，時刻 $t = 0$ における各頂点の状態

$$\boldsymbol{v}(0) = (v_1(0), \cdots, v_n(0))$$

を指定することにより，一意に定まることになる．なお，$\boldsymbol{v}(t)$ は時刻 t におけるすべての頂点の状態を n 次元ベクトルとして表したものであり，この

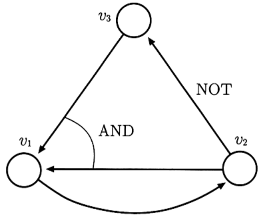


図 3　ブーリアンネットワークの例．

n 次元ベクトルはブーリアンネットワークの状態と呼ばれる．図 3 に示す例では，頂点の状態は次の規則により更新される．

$$v_1(t+1) = v_2(t) \wedge v_3(t),$$
$$v_2(t+1) = v_1(t),$$
$$v_3(t+1) = \overline{v_2(t)}.$$

この規則より，$\boldsymbol{v}(0) = (1,0,1)$ であったとき，

$$(1,0,1) \Longrightarrow (0,1,1) \Longrightarrow (1,0,0)$$
$$\Longrightarrow (0,1,1) \Longrightarrow (1,0,0) \Longrightarrow \cdots$$

と遷移することがわかる．最初以外は $(0,1,1)$ と $(1,0,0)$ という同じ状態が交互に繰り返されることになる．同じ状態系列の繰り返しはアトラクターと呼ばれ，同じ状態に戻るまでの遷移回数は周期と呼ばれる．一方，$\boldsymbol{v}(0) = (1,1,1)$ であったとき，

$$(1,1,1) \Longrightarrow (1,1,0) \Longrightarrow (0,1,0)$$
$$\Longrightarrow (0,0,0) \Longrightarrow (0,0,1) \Longrightarrow (0,0,1) \Longrightarrow$$

となり，後はずっと $(0,0,1)$ が続く．このブーリアンネットワークには上にあげた 2 種類のアトラクターのみが存在するため，周期 2 と周期 1 のアトラクターが 1 個ずつあることになる．異なるアトラクターは異なる細胞の種類に対応するという解釈があるため，その周期や分布については数十年にわたり多くの研究が行われてきた[10]．しかし，正確なことは未だにわかっていない．なお，スケールフリーネットワーク構造を持つブーリアンネットワーク上でのアトラクターの分布についても研究が行われている[3]．

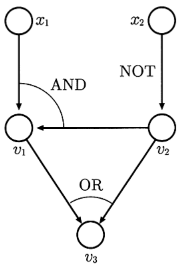
6. ブーリアンネットワークの制御

筆者らは，ブーリアンネットワークに基づき，遺伝子ネットワークの制御という問題に取り組んでいる[2)]．細胞や遺伝子ネットワークの制御はシステム生物学の目標の一つであり，将来的には，様々な病気の治療などにつながる可能性があると考えられている[15)]．もちろん，線形システムの制御についてはは確立した理論体系があるが，ブーリアンネットワークは非線形なモデルであり，線形システムの理論を直接は適用できない．

ブーリアンネットワークの制御モデルにおいては，内部頂点と呼ばれる通常の頂点 $v_1, \cdots, v_n$ に加えて外部頂点と呼ばれる制御用の頂点 $x_1, \cdots, x_m$ がある．外部頂点の状態は各時刻ごとに0,1を自由に制御できるものとし，時刻 $t+1$ における内部頂点の状態 $\boldsymbol{v}(t+1) = (v_1(t+1), \cdots, v_n(t+1))$ は，$\boldsymbol{v}(t) = (v_1(t), \cdots, v_n(t))$，および，$\boldsymbol{x}(t) = (x_1(t), \cdots, x_m(t))$ により定まるものとする．そして，内部頂点の時刻 $t=0$ における初期状態 $\boldsymbol{v}^0$ と時刻 $t=M$ における目標状態 $\boldsymbol{v}^M$ が与えられたときに，$\boldsymbol{v}(0) = \boldsymbol{v}^0$，および，$\boldsymbol{v}(M) = \boldsymbol{v}^M$ を満足するような外部頂点の状態列 $\boldsymbol{x}(0), \cdots, \boldsymbol{x}(M)$ を求めることが問題となる．

例えば，図4の例では，制御規則は

$$v_1(t+1) = x_1(t) \wedge v_2(t),$$
$$v_2(t+1) = \overline{x_2(t)},$$
$$v_3(t+1) = v_1(t) \vee v_2(t)$$



$\boldsymbol{v}^1$ (t=0)	0	0	0
$\boldsymbol{v}^M$ (t=3)	1	0	1

⇩

t	v_1	v_2	v_3	x_1	x_2
0	0	0	0	1	0
1	0	1	0	1	0
2	1	1	1	1	1
3	1	0	1	0	0

図4　ブーリアンネットワークの制御問題の例．

により与えられる．そして，$\boldsymbol{v}(0) = \boldsymbol{v}^0 = (0,0,0)$ と $\boldsymbol{v}(3) = \boldsymbol{v}^M = (1,0,1)$ を満足するような外部頂点の状態系列を求めることが問題となる．この場合，例えば，$\boldsymbol{x}(0) = (1,0)$, $\boldsymbol{x}(1) = (1,0)$, $\boldsymbol{x}(2) = (1,1)$, $\boldsymbol{x}(3) = (0,0)$ が解となる．ただし，目標状態によっては解なし，すなわち，外部頂点の状態系列が存在しないこともある．

外部頂点の状態系列は動的計画法により計算することができる．具体的には，$\{0,1\}^n \times \{0,1,\cdots,M\}$ の各要素に対し0か1の値をとる $D(b_1,\cdots,b_n,t)$ というテーブルを用意する．そして，$\boldsymbol{v}(t) = (b_1,\cdots,b_n)$ を初期状態として $\boldsymbol{v}(M) = \boldsymbol{v}^M$ に至らせる外部頂点の状態系列が存在する場合に $D(b_1,\cdots,b_n,t) = 1$ とし，それ以外は $D(b_1,\cdots,b_n,t) = 0$ であるものとする．すると，$t = M$ から $t = 0$ へという順にこのテーブルの値を計算していくことができる．いったんこのテーブルの値が計算できれば，外部頂点の状態系列を計算することができる．ただし，テーブルのサイズが $O(M \cdot 2^n)$ と大きくなり，かつ，各時刻ごとに 2^m 通りの外部頂点への0,1割り当てを試す必要があるため，時間計算量が指数オーダーになるという問題点がある．残念ながら，この問題は計算困難（NP困難）であるため，最悪の場合，指数オーダーになるということは避け難い[2)]．ネットワークの形状が木構造をなしている場合などにはより効率的に計算できるが，実際にはループ構造を含む場合がほとんどである．よって，遺伝子数が少ない場合のみを対象とするか，分枝限定法などに基づくアルゴリズムを開発することが必要となる．

上で説明した動的計画法アルゴリズムは，実は，ブーリアンネットワークの確率的拡張である確率ブーリアンネットワークに対してDoughertyらが提案した動的計画法アルゴリズム[9)]を簡単化したものである．彼らは確率的ブーリアンネットワークの制御について精力的に研究を続けており，筆者らも彼らの研究に刺激を受け研究を行っている．ところで，確率の有無に関わらずモデルが単純すぎることもあり，ブーリアンネットワークに対し

て良い制御法が見つかったとしても，それがすぐに実際の遺伝子ネットワークの制御につながるわけではない．しかし，これらは非線形モデルのある種の特徴を端的に捉えているため，非線形性が強いと思われる生体内ネットワークに関して有用な知見を与えてくれるものと考えている．

7. おわりに

生体内ネットワークに関するいくつかの研究を紹介してきた．生体内ネットワークがスケールフリーであるかどうかは議論の分かれるところであるが，ネットワークの解析が生命システムの理解のために重要であることは確かである．生物学的実験および数理モデルを両輪として研究が大きく進展することに期待したい．

参考文献

1) T. Akutsu and J.C. Nacher: Theoretical and computational analyses of structures of metabolic networks and protein-protein interaction networks, *The First International Conference on Computational Systems Biology*, 192–196, 2006.
2) T. Akutsu, M. Hayashida, W-K. Ching and M.K. Ng: Control of Boolean networks: Hardness results and algorithms for tree structured networks, *Journal of Theoretical Biology*, **244**:670–679, 2007.
3) R. Albert and A-L. Barabási: Dynamics of complex systems: scaling laws for the period of Boolean networks, *Physical Review Letters*, **84**: 5660–5663, 2000.
4) K.F. Aoki-Kinoshita, N. Ueda, H. Mamitsuka and M. Kanehisa: ProfilePSTMM: capturing tree-structure motifs in carbohydrate sugar chains, *Bioinformatics*, **22**:e25–e34, 2006.
5) M. Arita: The metabolic world of Escherichia coli is not small, *Proc. National Academy of Sciences USA*, **101**:1543–1547, 2004.
6) A-L. Barabási and R. Albert: Emergence of scaling in random networks, *Science*, **286**:509–512, 1999.
7) A-L. Barabási and Z.N. Oltvai: Network biology: understanding the cells' functional organization, *Nature Reviews Genetics*, **5**:101–113, 2004.
8) F.R.K. Chung, L. Lu, T.G. Dewey and D.J. Galas: Duplication models for biological networks, *Journal of Computational Biology*, **10**:677–687, 2003.
9) A. Datta, A. Choudhary, M.L. Bittner and E.R. Dougherty: External control in Markovian genetic regulatory networks, *Machine Learning*, **52**:169–191, 2003.
10) B. Drossel, T. Mihaljev and F. Greil: Number and length of attractors in a critical kauffman model with connectivity one, *Physical Review Letters*, **94**:088701, 2005.
11) N. Guelzim, S. Bottani, P. Bourgine and F. Képès: Topological and causal structure of the yeast transcriptional regulatory network, *Nature Genetics*, **31**:60–63, 2002.
12) H. Jeong, B. Tombor, R. Albert, Z.N. Oltvai and A-L. Barabási: Lethality and centrality in protein networks, *Nature*, **411**:41–42, 2001.
13) M. Kanehisa, S. Goto, M. Hattori, K.F. Aoki-Kinoshita, M. Itoh, S. Kawashima, T. Katayama, M. Araki and M. Hirakawa: From genomics to chemical genomics: new developments in KEGG, *Nucleic Acids Research*, **34**:D354–D357, 2006.
14) S.A. Kauffman: *The Origins of Order: Self-organization and Selection in Evolution*, Oxford Univ. Press, New York, 1993.
15) H. Kitano: Cancer as a robust system: implications for anticancer therapy, *Nature Reviews Cancer*, **4**:227–235, 2004.
16) M. Kotera, Y. Okuno, M. Hattori, S. Goto and M. Kanehisa: Computational assignment of the EC numbers for genomic-scale analysis of enzymatic reactions. *Journal of the American Chemical Society*, **126**:16487–16498, 2004.
17) 増田直紀，今野紀雄：『複雑ネットワークの科学』，産業図書，2005.
18) J.C. Nacher, M. Hayashida and T. Akutsu: Protein domain networks: Scale-free mixing of positive and negative exponents, *Physica A*, **367**:538–522, 2006.
19) E. Sprinzak and H. Margalit: Correlated sequence-signatures as markets of protein-protein interaction, *Journal of Molecular Biology*, **311**: 681–692, 2001.
20) M. Tanaka, T. Yamada, M. Itoh, S. Okuda, S. Goto and M. Kanehisa: Analysis of the differences in metabolic network expansion between prokaryotes and eukaryotes, *Genome Informatics*, **17(1)**: 230–239, 2006.
21) R. Tanaka, T.-M. Yi and J. Doyle: Some protein interaction data do not exhibit power law statistics, *FEBS Letters*, **579**:5140–5144, 2005.

（あくつ・たつや，
京都大学化学研究所バイオインフォマティクスセンター）

特　集（2007 年 7 月号予告）

代数的物理観

現代物理はいかに表現されているか

本体 952 円

物理を語るための代数という言葉	河東　泰之
作用素環と物理学	荒木不二洋
代数的量子論とミクロ・マクロ双対性	小嶋　泉
行列で表せる量子力学，表せない量子力学	松井　卓
量子計算とマジック行列	藤井　一幸
弦理論と量子コホモロジー	細野　忍
代数的位相幾何と物理	河野　俊丈
ラプラス–ルンゲ–レンツベクトル	国場　敦夫
無限グラフの構造とパーコレーション	樋口　保成
《名著に親しむ》	新井　朝雄

特　集（2007 年 5 月号）

数学の直観的理解

いかに使いこなすか

本体 952 円

数学と直観	薩摩　順吉
微積分の直観的理解	四ツ谷晶二
見えて動く線形代数	高橋　大輔
微分方程式　方程式を解くプロセスを味わう	松木平淳太
ベクトル解析　場を使いこなす	神谷　淳
関数論　複素関数なんて怖くない	及川　正行
確率論　運まかせに歩いてみると	服部久美子
幾何とトポロジー　イメージ力を養う	河澄　響矢
代数学の直観的理解　群論速習コース	桂　利行
《名著に親しむ》　直観に訴える数学書	薩摩　順吉
《連載》　重力理論入門　その 11	前田　恵一
ゲーム理論講義　その 8	船木由喜彦
《ネットワーク科学最前線》　第 8 回	有田　正規

編集後記

今回特集した位相の話は，量子情報やナノテクノロジーなど現代の先端技術には欠かすことのできない大切な概念です．とくに，人間が目や手を通して，そうしたミクロの世界に触れることができるのも，この位相のお陰と言えます．

春先にインフルエンザにかかり，回復するまでに一苦労しました．ウイルスが相手だけに，改めて目に見えないものの脅威を実感しました．その間に，満開の桜も葉桜に変わっていました．量子もウイルスも桜の花も，小さくても変化しているなあと思うこの頃です．　（伊崎）

＊　　　＊

今回の特集は，物理における位相，とりわけ量子現象にスポットを当てたものでした．いかがでしたでしょうか．

物理の様々な場面で幾何学の言葉は登場するわけで，それは量子現象に限らず，身近な所でも密接に関係しているように思います．その例として，力学の問題を調べるときに図形を用いることが一つ挙げられます．ビルを建設中のクレーンは力学で解析されたことを利用して重いものを持ち上げるわけです．

皆さんも身近に潜む物理や数学を探して，楽しんでみませんか？　（大溝）

数　理　科　学　6月号

2007 年 6 月 1 日発行　　発行人 森　平　勇　三

数 理 科 学 編 集 部
TEL. (03) 5474–8816
FAX. (03) 5474–8817

編集スタッフ
平 勢 耕 介　伊 崎 修 通
大 溝 良 平

ホームページ　http://www.saiensu.co.jp
ご意見・ご要望は　sk@saiensu.co.jp　まで．

発行所 © 株式会社 サ イ エ ン ス 社　TEL. (03) 5474–8500 (代表)
〒151–0051 東京都渋谷区千駄ヶ谷 1–3–25　振替 00170–7–2387　(03) 5474–8600 (広告部)

印刷・製本　三美印刷株式会社　山岡景仁

臨時別冊・数理科学

SGCライブラリ

(The Library for Senior & Graduate Courses)

近年，特に大学理工系の大学院の充実はめざましいものがあります．しかしながら学部上級課程並びに大学院課程の学術的テキスト・参考書はきわめて少ないのが現状であります．本ライブラリはこれらの状況を踏まえ，広く研究者をも対象とし，**数理科学諸分野**および**諸分野の相互に関連する領域**から，現代的テーマやトピックスを順次とりあげ，時代の要請に応える魅力的なライブラリを構築してゆこうとするものです．

装丁の色調は，

数学・応用数理・統計系（黄緑），**物理学系**（黄色），**情報科学系**（桃色），

脳科学・生命科学系（橙色），**数理工学系**（紫），**経済学等社会科学系**（水色）

と大別し，漸次各分野の今日的主要テーマの網羅・集成をはかってまいります．

表示価格はすべて税抜きです

No.	書名・著者	価格
1	**カオスと量子物理学** 中村勝弘著	本体 1857 円
3	**シュレーディンガー方程式** 仲滋文著	本体 1790 円
5	**有限体と符号理論** 内田興二著	本体 1667 円
8	**差分方程式講義** 広田良吾著	本体 1857 円
9	**生命をつくる** 中野馨著	本体 1524 円
11	**エコノミックゲームセオリー** 船木由喜彦著	本体 1429 円
12	**演習 場の量子論** 柏太郎著	本体 1886 円
16	**有限要素法による構造解析事例集** 白鳥正樹・三好俊郎編著	本体 1429 円
18	**独立成分分析** 甘利俊一・村田昇共編著	本体 1667 円
20	**物理数学ノート** 佐藤光著	本体 1819 円
21	**数学の未解決問題** 上野・高橋・中島共編	本体 1886 円
23	**微分幾何講義** 二木昭人著	本体 1857 円
24	**脳の謎に挑む** 茂木健一郎編著	本体 1829 円
26	**脳型コンピュータの実現に向けて** 甘利俊一編著	本体 1857 円
27	**ガロア理論** 中野伸著	本体 1790 円
28	**量子可積分系入門** 白石潤一著	本体 1876 円
29	**伝えるための理工系英語** 宮野健次郎著	本体 1429 円
30	**応用のための関数解析** 吉田善章著	本体 1800 円
31	**分子コンピュータの現状と展望** 萩谷昌己編著	本体 1524 円
32	**量子情報理論入門** 林正人著	本体 1886 円
33	**工学のための非線形解析入門** 藪野浩司著	本体 1857 円
34	**経済における確率的モデルへの招待** 青木正直著／青山・藤原監訳	本体 1886 円
35	**賭けの数理と金融工学** 竹内啓著	本体 1429 円
36	**応用のための確率論・確率過程** 松本裕行著	本体 1876 円
37	**情報理論の基礎** 村田昇著	本体 1619 円
38	**複素ニューラルネットワーク** 廣瀬明著	本体 1695 円
39	**マクスウェル方程式** 北野正雄著	本体 1876 円
40	**制御理論講義** 木村英紀著	本体 1886 円
41	**バイオインフォマティクスの基礎** 冨田勝監修・斎藤輪太郎著	本体 1857 円
42	**トポロジー入門** 田中利史・村上斉共著	本体 1886 円
43	**アルゴリズムと計算量** 谷聖一著	本体 1857 円
44	**ゲーム理論のフロンティア** 池上高志・松田裕之共編著	本体 1829 円
45	**ゲージ場の量子論入門** 近藤慶一著	本体 1886 円
46	**現代物理のための解析力学** 早田次郎著	本体 1857 円
47	**現代物理数学への招待** 鈴木淳史著	本体 1876 円
48	**例題形式で学ぶ現代素粒子物理学** 川村嘉春著	本体 1886 円
49	**ソリトンと物理学** 戸田盛和著	本体 1876 円
50	**確率的情報処理と統計力学** 田中和之編著	本体 1857 円
51	**超対称性理論** 太田信義・坂井典佑共著	本体 1819 円
52	**理工系のためのトポロジー・圏論・微分幾何** 谷村省吾著	本体 1886 円
53	**ゲノム進化を考える** 斎藤成也著	本体 1429 円
54	**非平衡統計力学** 早川尚男著	本体 1790 円
55	**超幾何関数入門** 木村弘信著	本体 1857 円

数学関連好評書より(3)

ベクトル解析の基礎

寺田文行・木村宣昭共著／A5／120頁／本体1250円
完全見開き形式となっているため見易く，また，図や例が豊富なので非常に理解し易いテキストとなっている．

基礎と応用 ベクトル解析

清水勇二著／A5／160頁／本体1600円
多変数の世界に親しみ，物理・化学への応用や一般次元でのストークスの定理やガウスの公式の数学的取り扱いを目標とした．

複素関数の基礎

寺田文行著／A5／168頁／本体1600円
左頁に解説，右頁に図やポイント，小問を配置する見開き形式で，関数論の基礎から応用まで1つ1つステップアップできる懇切丁寧なテキスト．

理工系 複素関数論
多変数の微積分から複素解析へ

柴雅和著／A5／216頁／本体1600円
実解析の復習から複素関数論を平易に解説した大学初年級向け教科・参考書・問題を通して「考え方の獲得」と「計算の練習」ができる．

基礎課程 複素関数論

占部博信著／A5／200頁／本体1600円
多くの具体例を通して，をモットーに，複素関数論の理論と応用について簡潔にしかも丁寧に解説した理工系向の恰好の教科・参考書．

改訂 関数論

洲之内治男・猪股清二共著／A5／168頁／本体1340円
好評テキスト「関数論」の改訂版．旧版の特色を保持しつつ書き改めることにより，一層の明解さをはかった．豊富な例題・演習問題が理解を助ける．

新版 応用のための関数解析
その考え方と技法

吉田善章著／A5／248頁／本体1900円
関数解析の理論を量子論や電磁気学，流体力学などの現実的な問題と結びつけて解説することを目的としている．

改訂 関数解析入門

洲之内治男著／A5／184頁／本体1800円
前著のコンパクトさや，応用に役立つ関数解析の基礎事項の明確な理解と十分な実力を養えるような構成を保ちつつ，改訂した．

フーリエ解析・ラプラス変換

寺田文行著／A5／112頁／本体1200円
フーリエ解析とラプラス変換を具体例や問などを豊富に用いて，各項目を見開き形式で簡潔かつわかりやすく解説．

フーリエ解析とその応用

洲之内源一郎著／A5／124頁／本体1480円
フーリエ解析を数学的厳密さを失わず平易に論じ，その応用として偏微分方程式の境界値問題の解法を中心に具体例を選びながら解説したテキスト．

表示価格はすべて税抜きです

サイエンス社

好評の数学演習書より(1)

演習と応用　線形代数
寺田文行・木村宣昭共著／A5／200頁／本体1700円
精選された豊富な例題と問題を通して，各項目の着実な理解と技術的な習得ができるよう工夫がこらされている．見開き構成，2色刷．

演習　行列・微積分
寺田文行・久保創共著／A5／224頁／本体1553円
本書は数学的素養を必要とする人々すべてを対象とし，各例題・問題が頁単位で構成され，初学者が容易に取り組めるように配慮されている．

演習と応用　微分積分
寺田文行・坂田泩共著／A5／216頁／本体1700円
基本事項の解説に続き，洗練された例・問題とその詳しい解答により，大学で学ぶ微分積分をより深く理解できるよう構成されている．2色刷．

演習　応用解析
洲之内治男・寺田文行・網屋正信・小島清史共著
A5／248頁／本体1553円
微分方程式・フーリエ解析・関数論等を比較的短い期間で修得しようとする人のための演習書．

演習と応用　関数論
寺田文行・田中純一共著／A5／168頁／本体1600円
複素関数論の基礎概念を，精選された例題・問題と丁寧な解答を通して，全般にわたり着実に学習できる，学生必携の演習書．2色刷．

FORTRANによる
演習　数値計算
洲之内・寺田・四条共著／A5／230頁／本体1553円
アルゴリズムの定式化，計算ステップの構成法，プログラム作成上の注意事項等に重点をおいた．

演習と応用　ベクトル解析
寺田文行・福田隆共著／A5／208頁／本体1700円
本書は講義中心になりがちな斯学において，より多くの練習問題をこなす学習の助けとなることを目的としている．2色刷．

演習　確率統計
洲之内・寺田・舟根共著／A5／216頁／本体1553円
基本的かつ実用上重要な問題を精選し，それらの例題を通して①理論体系の流れの理解とともに，②基本的な計算力の養成を主眼としてまとめた．

演習と応用　微分方程式
寺田・坂田・曽布川共著／A5／224頁／本体1800円
問題解決法，例題・問題・くわしい解答という構成．見やすい見開き体裁，2色刷の使いやすく，わかりやすい演習書．

基本演習確率統計
和田秀三著／A5／232頁／本体1700円
大学初年級・高専などの学生向けに，理系・文系を問わず重要性を増してきている統計学を自習できるよう，基本的な問題を精選・解説．2色刷．

表示価格はすべて税抜きです

サイエンス社

物理学・化学演習書

新・演習 物理学
阿部龍蔵・川村清・佐々田博之共著
A5／288頁／本体2000円
テキスト「物理学[新訂版]」の対となる理工系向け演習書.

新・演習 力学
阿部龍蔵著／A5／192頁／本体1850円
本書はテキスト「力学［新訂版］」の対となる理工系向け演習書である. 数式を楽に追えるなど, 初学者にも十分理解できるよう工夫した.

新・演習 電磁気学
阿部龍蔵著／A5／208頁／本体1850円
基本事項をコンパクトにまとめ, 洗練された例題・問題と詳しい解説で深い理解と真の応用力が涵養できるよう工夫されている.

演習 力学 [新訂版]
今井・高見・高木・吉澤・下村共著
A5／192頁／本体1500円
本書は長い間好評を得てきた「演習力学」の新訂版. 初学者に力学の本質をどうやって理解してもらうかという点に特に配慮して解説.

新・演習 量子力学
阿部龍蔵著／A5／192頁／本体1800円
初めて量子力学を学ぶ理工系学生向けの演習書. 基本事項をコンパクトにまとめ, 精選された例題・問題と詳しい解答で深い理解と真の応用力が涵養できるよう工夫されている.

新・演習 熱・統計力学
阿部龍蔵著／A5／184頁／本体1800円
本書は「熱・統計力学入門」に準拠した演習書である. 基本事項をコンパクトにまとめ, 洗練された例題・問題と詳しい解答で深い理解と真の応用力がつくよう工夫されている.

演習 有機化学 [新訂版]
杉森彰著／A5／256頁／本体1980円
有機化学の基本的な考え方を身につけるための演習書. 好評を博した前著を, さらに容易に理解することができるよう２色刷に改めた.

演習化学熱力学 [新訂版]
渡辺啓著／A5／240頁／本体1850円
長年好評を博してきた「演習化学熱力学」の新訂版. 熱力学の化学への応用に重点をおいた演習書. 例題は見開きにし, 問題解答も詳しくわかりやすい.

演習 物理化学 [新訂版]
渡辺啓著／A5／256頁／本体1950円
長年好評を博してきた「演習物理化学」の新訂版. 解説→例題→演習問題の構成により確実な学習ができる.

演習 分析化学
綿抜邦彦著／A5／96頁／本体1100円
本書は, 初学者にも分析化学で用いるいろいろな計算ができるように初歩の計算から導入した. 例題には詳しい解答をつけた.

表示価格はすべて税抜きです

サイエンス社

既刊の好評書より

一歩踏み込む
LaTeXの基本
入力支援環境「祝鳥(のりてふ)」を用いた文書作成
阿部紀行著／A5／288頁／本体2200円
LaTeXの統合環境を実現する秀丸エディタ用マクロ「祝鳥」を利用し，簡単かつ華麗に構築できる．

やさしく学べる
pLaTeX 2ε入門
文書作成からプレゼンテーションまで
皆本晃弥著／B5／256頁／本体2700円
情報処理教育としての講義・演習にも使える入門書．

Mathematicaの基礎と応用
分かりやすいプログラミング
小国力著／A5／240頁／本体2200円／カラー口絵4頁
Mathematicaの基本的な機能を使えることを目的とした平易な解説書．

ダイナミックシステムの統計的解析と制御［新訂版］
赤池弘次・中川東一郎共著
A5／208頁／本体2300円
不規則変動を示すシステムの計算機制御を実現するための統計的方法を具体例にそくして解説．

UNIXユーザのための
トラブル解決 Q&A
皆本晃弥著／B5／176頁／本体1800円

シェル&Perl入門
bash/tcsh/grep/sed/awk/Perl
皆本晃弥・奥村浩共著／B5／280頁／本体2950円

カオス
カオス理論の基礎と応用
合原一幸編著／A5／360頁／本体3500円
カオスの重要性への認識が広まるとともに，その“乱用”も多く見られるようになった．カオスとは一体何なのか．本書がその研究の現状を紹介する．

CによるCGレイトレーシング
［カラー口絵］
千葉則茂・村岡一信共著／A5／328頁／本体2800円
３次元CGの手法を明解に解説した好著．下記のHPより，掲載されたプログラムをダウンロードできる．
http://www-cg.cis.iwate-u.ac.jp/lab/download/index.html

左記「CによるCGレイトレーシング」をベースに，デジタル化効果を活用したレイトレーシングのデジタル教科書
デジタルメディアテクストブック「３次元CGシリーズ」―レイトレーシング法の実際―（開発：㈱ジェーエフピー）
も別売しております．**サイエンス社営業部**にご注文いただけますと**割引価格9,640円**（税・送料込）でご購入いただけます．（料金後払い）

新装版 UNIXワークステーションによる
科学技術計算 ハンドブック
［基礎篇C言語版］
戸川隼人著／A5／568頁／本体3800円
アルゴリズム全部にCによるプログラムを付す．

Computing辞典
オックスフォード大学出版局刊
野崎昭弘・中川圭介・玉井浩共訳
A5／528頁／本体5800円
コンピューティングと，数学，論理，電子工学等の関連分野の4500以上の用語を収録，解説．

表示価格はすべて税抜きです

サイエンス社

脳と心をさぐる

ギブソン
生態学的視覚論
古崎敬他訳／A5／392頁／本体4175円
「アフォーダンス」により，改めて脚光を浴びるギブソンの名著．環境の中の知覚を詳細に解説．

記憶と脳
過去・現在・未来をつなぐ脳のメカニズム
久保田競編／松波・船橋・櫻井共著
A5／216頁／本体2200円
世界的にも活躍中の著者陣が，その研究成果を分かりやすく紹介する．

Q&Aでわかる
脳と視覚
人間からロボットまで
乾敏郎著／A5／232頁／本体2233円
Q&A形式でいま何がわかっているのか，何を研究すべきかをできるかぎりやさしく解説．

感性の科学
感性情報処理へのアプローチ
辻三郎編／A5／224頁／本体2400円
情報科学と心理学の両面から取り組まれた学際的研究プロジェクトの成果を基に，人間の感性への科学的アプローチを紹介・解説する．

ニューロサイエンス入門
松村道一著／A5／344頁／本体2700円
読者の予備知識を極力仮定せずに分かりやすく説きおこした最新の解説書．脳と心への多種多様なアプローチを一目で見渡せる．

思考と脳
考える脳のしくみ
渡邊正孝著／A5／216頁／本体1900円
思考と呼ばれる脳の機能とは一体何なのであろうか？ 気鋭の研究者である著者が，有名な「フィネアス・ゲージ」の脳損傷事故から研究の最先端に至るまで様々な角度から分かりやすく解説．

最新 運動と脳
体を動かす脳のメカニズム
松波謙一・内藤栄一共著
A5／264頁／口絵4頁／本体2400円
科学における最後の秘境といわれる脳と運動の関係を気鋭の著者がわかりやすく解説する．

意識と脳
心の電源としての意識
山本健一著／A5／240頁／本体2200円
長年，臨床と研究の両面から意識の謎を追究してきた著者がその成果をまとめた意欲作．

脳科学への招待
神経回路網の仕組みを解き明かす
松村道一著／A5／232頁／本体1900円
世界的規模で研究が進められている脳科学・神経科学の領域を概観するとともに，その必須の基礎的事項についてわかりやすく解説する．

映像の心理学
マルチメディアの基礎
中島義明著／B6／280頁／本体2400円
人間が情報として映像をどのように摂取しているのかをトピックスを中心として実証的データにもとづいて解説．

表示価格はすべて税抜きです

サイエンス社